

Semiklassische Dynamik ultrakalter Bose-Gase

Dissertation

zur Erlangung des akademischen Grades
Doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat.)

vorgelegt
der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften
der Technischen Universität Dresden

von
Dipl. Phys. Lena Simon

geboren am 9. September 1980 in Nürnberg

eingereicht am 23. November 2012

Die Dissertation wurde in der Zeit von 04/2008 bis 11/2012
am Institut für Theoretische Physik angefertigt.



1. Gutachter: Prof. Dr. Walter Strunz
2. Gutachter: Prof. Dr. Gernot Alber
Verteidigt am 31.01.2013

Kurzfassung

Die Dynamik anfänglich aus dem Gleichgewicht gebrachter wechselwirkender Quantenvielteilchensysteme wirft aktuell noch spannende Fragen auf. In Bezug auf die Thermalisierung ist z.B. nach wie vor ungeklärt, in welcher Form sie überhaupt stattfindet und in welchen Observablen bzw. auf welcher Zeitskala sie zu beobachten ist. Eine ideale Grundlage zur Erforschung von Relaxationsdynamiken in wechselwirkenden Vielteilchensystemen bieten ultrakalte Quantengase aufgrund ihrer guten Kontrollier- und Variierbarkeit. Ein allgemeiner theoretischer Rahmen, auf dessen Basis solche Prozesse zu untersuchen sind, steht jedoch infolge der großen Anzahl der beteiligten Freiheitsgrade bisher nicht zur Verfügung.

Für ultrakalte bosonische Gase stellt die Gross-Pitaevskii-Gleichung eines der wichtigsten theoretischen Werkzeuge dar, eine klassische Feldgleichung für die Kondensatwellenfunktion in Molekularfeldnäherung. Die ihr zugrunde liegende Näherung erlaubt jedoch keine nicht-trivialen Aussagen über den vollen N -Teilchenzustand, dessen Kenntnis für die Untersuchung einer möglichen Relaxationsdynamik unabdingbar ist.

Um der theoretischen Beschreibung des vollen bosonischen Feldes einen Schritt näher zu kommen, untersucht die vorliegende Arbeit die Anwendung semiklassischer Methoden auf ultrakalte Bosegase. Diese sind in der Regel dann sehr genau, wenn die beteiligten Wirkungen groß gegenüber dem Planckschen Wirkungsquantum sind. Für bosonische Felder wird dieser Grenzfall durch die Bedingung einer großen Teilchenzahl ersetzt. Die immense Anzahl an Teilchen in den hier behandelten Vielteilchensystemen macht die Anwendung semiklassischer Methoden auf diesem Gebiet also vielversprechend.

Als zentrales Modellsystem wird ein anfänglich aus dem Gleichgewicht gebrachtes ultrakaltes bosonisches Doppelmuldensystem betrachtet, das eine hochinteressante Dynamik aufweist, die auf das Wechselspiel der Tunneldynamik einerseits und der Wechselwirkung der Teilchen untereinander andererseits zurückzuführen ist. Als Referenz lassen sich aufgrund der speziellen Fallengeometrie im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung die Ergebnisse einer numerisch exakten Untersuchung heranziehen. Durch den Einsatz der namhaften WKB-Quantisierung und des besonders aus der Molekülphysik bekannten Reflexionsprinzips wird hier ein geschlossener analytischer Ausdruck für die sogenannte Populationsdifferenz im Doppelfeldminimum

hergeleitet, der ausschließlich von den wenigen relevanten Systemparametern abhängt. Diese mächtige Formel erlaubt es nun zum ersten Mal, in quantitativer Weise die charakteristische Sequenz aus Oszillationen, Kollapsen und Revivals in Abhängigkeit der vorausgesetzten Parameter zu untersuchen.

Nach dieser ersten erfolgreichen Anwendung semiklassischer Methoden im Modellsystem wird über die reduzierte Dynamik der Populationsdifferenz hinausgegangen. Mithilfe des semiklassischen Herman-Kluk-Propagators lässt sich selbst der volle N -Teilchenzustand untersuchen. Da es letztlich um die Beschreibung ultrakalter Bosonen in beliebigen Potentialen gehen soll, wird zunächst der Herman-Kluk-Propagator für eine Feldtheorie vorgestellt. Im Doppelmuldensystem zeigt sich dann in der Anwendung die semiklassische Propagation in der Lage, für alle untersuchten Parameterregime gute Übereinstimmung mit den numerisch exakten Ergebnissen zu liefern. Zusätzlich findet ein Abgleich der Resultate mit der “Truncated Wigner Approximation” statt, auf die im Forschungsgebiet ultrakalter Bosonen häufig zurück gegriffen wird. Diese beschreibt die Zeitentwicklung einer Wignerverteilung unter Aussparung der Quanteninterferenzen. In der vorliegenden Arbeit wird gezeigt, dass die Herman-Kluk-Propagation unter Berücksichtigung der Phasen weit über die “Truncated Wigner Approximation” hinausgeht: Sie gibt alle wichtigen Charakteristika der Dynamik im Doppelmuldensystem wieder.

Um die Semiklassik auf ihre Aussagefähigkeit in Bezug auf eine noch komplexere Dynamik zu untersuchen, wird zum Abschluss das Drei-Topf-System betrachtet, das zusätzlich chaotische Regionen im Phasenraum aufweist. Auch hier zeigt sich, dass die semiklassische Berücksichtigung der Phasen die “Truncated Wigner Approximation” in den Schatten stellt. Allerdings ergeben sich durch die Instabilität der Trajektorien für stark chaotische Regime numerische Probleme, die es in der Zukunft zu lösen gilt.

Abstract

The dynamics of initially non equilibrium interacting quantum many body systems is an ongoing and interesting field of research. It is still an open question in which form relaxation occurs in such systems, and in which observables and on which timescales a possible thermalization might appear. A perfect playground for the investigations of relaxation dynamics in interacting many body schemes is provided by ultracold quantum gases, which are easily to be controlled and varied in experiments. However, a general theoretical framework for the investigation of such processes is still missing, due to the huge amount of involved degrees of freedom.

One of the main theoretical tools in the field of ultracold bosonic gases represents the famous Gross-Pitaevskii equation, a field equation for the Bose-Einstein condensate wave function in terms of a mean-field approximation. However, the underlying approximation prevents the possibility to draw non-trivial conclusions about the full N -particle state, the information of which is necessary for the analysis of relaxation processes.

To gain the theoretical description of the full bosonic field, the present thesis deals with the application of semiclassical methods to ultracold boson gases. Those techniques become in general exact, as long as the involved actions are large compared to Planck's constant. For many body systems it turns out that semiclassics are expected to give good results also for the condition of high particle numbers, which is precisely fulfilled in these schemes, making the semiclassical approaches promising.

As an essential model system an initially out of equilibrium ultracold bosonic double-well system is investigated. This configuration provides highly interesting dynamics due to the interplay of the tunneling dynamics on the one hand and the interaction amongst the particles on the other. The special trap geometry makes exact numerical calculations in the framework of the two-mode approximation available, which serve in the following as reference data. By applying the common semiclassical WKB approximation and the reflection principle known from molecule physics, a closed analytical expression for the so-called population imbalance of the bosons in the double-well is derived, depending only on the few relevant system parameters.

This mighty formula allows for the first time the quantitative investigation of the characteristic sequence consisting of oscillations, collapse and revivals in dependence on the parameters of the system.

Since the semiclassical approaches succeeded for the double-well model so far the so-called Herman-Kluk propagator is adopted, to go beyond the reduced dynamics of the population imbalance. The propagator provides the possibility to treat the full N -particle state theoretically and is introduced for the most general case of a bosonic quantum field. Its application to the double-well system yields for all investigated parameter regimes very good agreement with the numerical exact results. Furthermore the outcomes are compared to the Truncated Wigner approximation, which is frequently used in the research field of ultracold bosons. This approach pictures the time evolution of a Wigner distribution, without taking into account the quantum interferences. In the present thesis it is shown that the Herman-Kluk propagation goes clearly beyond the truncated Wigner approach by considering in addition the quantum phases: The propagator is able to reproduce all of the distinctive features of the double-well dynamics.

In order to test the performance of semiclassical methods in matters of even more complex systems, the ultracold bosonic triple-well model is finally considered, which exhibits unlike the double-well scheme chaotic regions in phase space. It turns out that the semiclassical propagation outplays again the truncated Wigner approximation. On the other hand the instability of the highly chaotic trajectories causes numerical problems, which have to be solved in the future.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	iii
Abstract	v
1 Einleitung	1
2 Theoretische Beschreibung eines Bose-Einstein-Kondensats	9
2.1 Das wechselwirkende Bose-Gas	10
2.2 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung	13
2.3 Wigner-Darstellung	15
3 Semiklassische Methoden	19
3.1 Semiklassische Quantisierung	20
3.2 Semiklassische Propagatoren	21
3.2.1 Der van Vleck-Gutzwiller-Propagator	21
3.2.2 Der Herman-Kluk-Propagator	23
3.3 Truncated Wigner Approximation	28
4 Ultrakalte Bosonen im Doppelmuldenpotential	31
4.1 Experimentelle Realisierung	32
4.2 Theoretische Beschreibung ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential	34
4.2.1 Zwei-Moden-Näherung	34
4.2.2 Klassische Beschreibung	38
4.3 Dynamik im Doppelmuldenpotential	40
4.3.1 Dynamik im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung	40
4.3.2 Klassische Dynamik und deren Darstellung im Phasenraum	49
5 Semiklassische Beschreibung der Dynamik im Doppelmuldenpotential	57
5.1 WKB-Näherung zur Bestimmung des Spektrums	57
5.2 Die Matrix A_{nm}	62
5.2.1 Der Anfangszustand	66
5.2.2 Reflexionsprinzip	68
5.3 Semiklassische Dynamik der Populationsdifferenz	70

5.3.1	Rabi-Limes	73
5.4	Ergebnisse:	
	Vergleich numerisch exakt vs. Semiklassik und Rabi-Limes	74
5.4.1	Oszillationsfrequenz	74
5.4.2	Kollapszeit	80
5.4.3	Revivalzeit	82
5.4.4	Einfluss der höheren Nebendiagonalen	83
5.4.5	Der klassische Grenzfall	86
6	Semiklassische Propagation des Doppelmuldensystems	87
6.1	Truncated Wigner Approximation im Doppelmuldensystem	87
6.2	Anwendung des HK-Propagators auf das Doppelmuldensystem	93
6.2.1	Semiklassische Wellenfunktion	99
7	Dynamik im Drei-Topf-System	103
7.1	Theoretische Beschreibung der Dynamik im DTS	104
7.1.1	TWA im Drei-Topf-System	109
7.1.2	HK-Propagation im Drei-Topf-System	110
7.2	Vergleich der Ergebnisse	111
8	Zusammenfassung und Ausblick	117
	Literaturverzeichnis	121
	Anhang	131
A	Berechnung des Überlapps der kohärenten Zustände	131
B	Dynamik der Monodromiematrix im Doppelmuldensystem	133
C	Zeitentwicklung der Monodromiematrix im DTS	134

1 Einleitung

Aus den Augen verloren, wird ein gut gekühltes Bier allmählich Raumtemperatur annehmen. Diese Thermalisierung ist eine fundamentale Eigenschaft unserer Natur: Ein System befindet sich erst dann im thermischen Gleichgewicht, wenn es durch wenige makroskopische Größen zu charakterisieren ist, die in der Zeit konstant bleiben. Im vorliegenden Fall wäre die entscheidende physikalische Größe die Temperatur. Wie nun die Erwärmung des Bieres den Genießer im Physiker enttäuscht, fasziniert den Physiker im Genießer seit mehr als 100 Jahren die nach wie vor ungelöste Fragestellung, wie eine Ableitung der Thermalisierung aus den grundlegenden dynamischen Gesetzen der Physik theoretisch zu beschreiben wäre. Aus dem Blickwinkel der auf Boltzmann zurückgehenden klassischen statistischen Mechanik basiert solch ein Übergang ins Gleichgewicht auf einem Mangel an Information zum exakten physikalischen Zustand, so dass sich letztlich nur Ensemblemittel beobachten lassen. Selbstverständlich wäre im Prinzip auch eine theoretische mikroskopische Betrachtung denkbar, auf deren Ebene keine Relaxationen auftreten. In der Praxis jedoch ist dieser Ansatz aufgrund der immensen Anzahl beteiligter Freiheitsgrade bis heute rechnerisch nicht zu bewältigen.

Wie aber ist die Physik anfänglich aus dem Gleichgewicht gebrachter wechselwirkender Vielteilchensysteme auf der Basis der Quantentheorie zu fassen? Zwar gibt es seit vielen Jahren quantenkinetische Theorien im Rahmen der Quanten-Boltzmann-Gleichung, die bereits reduzierte, also gemittelte Größen behandeln. Ein allgemeiner theoretischer Zugang zur Beschreibung solcher Prozesse auf Basis des vollen N -Teilchenproblems ist bisher allerdings nicht verfügbar, was das Gebiet der Relaxation in Quantenvielteilchensystemen zu einem aktuellen und beliebten Forschungsgebiet macht. Besonders in geschlossenen Quantenvielteilchensystemen ist nach wie vor ungeklärt, unter welchen Umständen und in welchen Observablen ein System relaxiert und welche physikalischen Eigenschaften für einen eventuellen Übergang in ein Gleichgewicht verantwortlich sind [1, 2]. Eine globale Relaxation kann in geschlossenen Systemen, in denen kein Energieaustausch mit einer Umgebung stattfindet, natürlich nicht vorkommen. Diesem Sachverhalt zum Trotz wurden Langzeitdynamiken beobachtet [2], die bestimmte Observablen betreffend durch einen asymptotischen Zustand charakterisiert sind. Diese Relaxation ist letztlich auf die Wechselwirkung zurückzuführen, und sie ist nicht von unendlicher Dauer. Die Abgeschlossenheit der Systeme lässt sogenannte Revivals

erwarten, obwohl solche asymptotischen Zustände mit steigender Anzahl der Freiheitsgrade des Systems durchaus auf extrem großen Zeitskalen bestehen können [3].

Ein beliebtes Szenario zur Untersuchung von Nichtgleichgewichts-Quantendynamik bieten sogenannte Quanten-“Quenches” [1]: Nach dem Start von einem Eigenzustand eines gegebenen Hamiltonoperators wird das System durch eine plötzliche Veränderung seiner Parameter aus dem Gleichgewicht gebracht, was zu einem neuen System-Hamiltonoperator führt. Überlässt man das System nun sich selbst, entwickelt es sich entsprechend dem neuen Hamiltonian in der Zeit.

Ein solcher “Quench” findet z.B. bei der Initiierung der Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential Anwendung [4]. Durch das Ineinandergreifen der Wechselwirkung der Atome untereinander einerseits und der Tunneldynamik durch die Potentialbarriere zwischen den Mulden andererseits ergibt sich eine überaus interessante Dynamik, die unter anderem Gegenstand der vorliegenden Arbeit sein wird.

Das theoretische Interesse an Relaxationsprozessen in geschlossenen Quantensystemen gewann in den letzten Jahren mit den immer neuen experimentellen Möglichkeiten an Bedeutung. Anordnungen aus wenigen ultrakalten Bosonen oder Bose-Einstein-Kondensaten in optischen Gittern stellten sich als interessante Modellsysteme heraus [5, 6]. Experimentell relativ gut zu kontrollieren, bieten sie die Möglichkeit, unterschiedlichste Quantenvielteilchenphänomene experimentell zu untersuchen.

Die Geschichte der experimentellen Realisierung von Bose-Einstein-Kondensaten und ultrakalten Bosonen in verschiedensten Fallengeometrien ist eine lange und erfolgreiche. Carl Wieman und Eric Cornell gelang es 1995 als ersten, ca. 2×10^4 ^{87}Rb -Atome durch Abkühlen auf einige hundert Nanokelvin kondensieren zu lassen [7]. Diese Sensation machte Bose-Einstein-Kondensation zu einem populären Forschungsthema in der Quantenphysik. Bereits 1924 sagte Einstein [8] auf Gedanken von Bose [9] aufbauend voraus, dass sich bei hinreichend kleinen Temperaturen alle Teilchen in dem niedrigsten Energiezustand eines Systems ansammeln würden, woraus sich einige ungewöhnliche Eigenschaften ergeben. Die makroskopische Besetzung des Grundzustandes nun wird als Bose-Einstein-Kondensation bezeichnet. Wie sich im Laufe der Jahre herausstellte, tritt Bose-Einstein-Kondensation nur bei Bosonen auf, also Teilchen mit ganzzahligem Gesamtspin, während Fermionen, Teilchen mit halbzahligem Gesamtspin, einen Quantenzustand nur einfach besetzen können.

Die Aussicht auf ein makroskopisches Quantensystem, dessen Teilchen alle die gleichen physikalischen Eigenschaften besitzen, insbesondere identische Orts- und Geschwindigkeitsverteilungen, initiierte umfassende Forschungsanstrengungen zur

Herstellung eines Bose-Einstein-Kondensates. Allerdings blieb viele Jahre ungeklärt, wie hinreichend tiefe Temperaturen technisch zu erreichen wären.

Die Weiterentwicklung laserbasierter Techniken in den 80er Jahren erlaubte es dann, elektrisch neutrale Atome magneto-optisch einzufangen und zu kühlen. Alkali-Atome erwiesen sich als besonders gut geeignet, da deren optische Übergänge von den handelsüblichen Lasern angeregt werden können. 1995 folgte die erste Beobachtung eines atomaren Bose-Einstein-Kondensates durch Wieman und Cornell, und noch im selben Jahr konnte die Gruppe um Wolfgang Ketterle [10] ein Bose-Einstein-Kondensat (BEK) aus Natrium-Atomen und die Gruppe um Randall Hulet [11] ein Kondensat aus Lithium-Atomen erzeugen. Wieman, Cornell und Ketterle teilten sich für ihre bahnbrechenden Arbeiten den Physik-Nobel-Preis des Jahres 2001. Die Abbildung 1.1 zeigt die ersten Aufnahmen eines atomaren Bose-Einstein-Kondensates durch Cornell und Wieman [7].

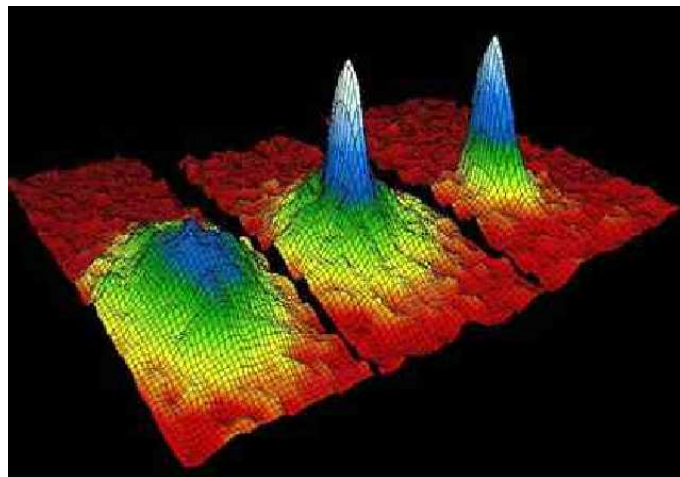


Abbildung 1.1: Die erste Beobachtung eines atomaren Bose-Einstein-Kondensates (aus [7]). Kurz vor dem Auftreten der Kondensation zeigt die Geschwindigkeitsverteilung links eine thermische Wolke. Nach dem Phasenübergang entsteht eine schmale zentrale Komponente, die dem Kondensat entspricht (Mitte). Bei weiterer Kühlung verschwindet die thermische Komponente ganz (rechts).

Dank der Weiterentwicklung der Kühlverfahren und Atomfallen werden Bose-Einstein-Kondensate heute aus immer neuen, meist schwach wechselwirkenden Atomsorten in einer Vielzahl an Fallengeometrien [12, 13] hergestellt. Die schwache Wechselwirkung der Atome untereinander erlaubt theoretische Zugänge zu vielen Problemstellungen, die in stark wechselwirkenden Systemen, wie zum Beispiel Supraflüssigkeiten, nicht möglich sind. Da die Stärke der Wechselwirkung in solchen

Systemen mit Hilfe sogenannter Feshbach-Resonanzen [14] veränder- und kontrollierbar ist, eröffnet sich die Möglichkeit, die Wechselwirkung zwischen den Atomen zu manipulieren, was das Forschungsinteresse an kalten Bose-Gasen weiter steigen lässt.

Insgesamt wurde in den letzten Jahren eine Fülle an Experimenten realisiert, die zu tiefen Einblicken in fundamentale Quantenvielteilchenphänomene führten. Es ließen sich unter anderem quantisierte Wirbel (sogenannte Vortizes) [15], Solitonen [16, 17] und Anderson-Lokalisierung [18] in BEKs beobachten. Die Kohärenzeigenschaften von BEKs ermöglichen zudem die experimentelle Untersuchung von Interferenzphänomenen [19, 20, 21]. Die Überlagerung zweier BEKs führt zu einem Interferenzmuster ähnlich dem eines Doppelspalt-Experimentes, obwohl hier mehrere tausend Atome beteiligt sind: ein makroskopisches Quantenphänomen.

Ein weiterer wichtiger Forschungsbereich umfasst Experimente mit ultrakalten Bosonen in optischen Gittern [22]. Durch die Überlagerung von Laserstrahlen wird ein Gitter bestehend aus hunderten oder tausenden optischer Mikrofallen für ultrakalte Bosonen oder Fermionen erzeugt. Die relativ gute Kontrollier- und Variierbarkeit der Systemparameter macht solche Anordnungen zu mächtigen Systemen zur Untersuchung der Physik von Quantenvielteilchensystemen und insbesondere Festkörpermodellen [23, 24, 25]. In einem solchen Versuchsaufbau konnte z.B. der Phasenübergang von einem Mottisolator zu einer Supraflüssigkeit beobachtet und untersucht werden [26].

Optische Gitter sind in den letzten Jahren auch im Zusammenhang mit dem oben genannten Forschungsgebiet der Relaxation in geschlossenen Quantensystemen interessant geworden [5, 6, 3, 1, 27, 28, 29]. Gewöhnlich bilden stark miteinander wechselwirkende ultrakalte Bosonen in optischen Gittern die Grundlage dieser experimentellen und theoretischen Untersuchungen. Die Abbildung 1.2 zeigt experimentell gewonnene Absorptionsbilder aus [5]. Die Gruppe um Weiss erzeugte eine Quantenversion des berühmten sogenannten Newtonpendels, indem sie einen Nichtgleichgewichtszustand einer eindimensionalen Kette optisch gefangener Bose-Gase präparierte. Nach einer bestimmten Zeitspanne, in der die Atome sich selbst überlassen blieben, wurden Absorptionsbilder aufgenommen. Diese zeigten, dass das eindimensionale System trotz der stattfindenden Kollisionen der Atome untereinander kein thermisches Gleichgewicht erreicht, was auf die Eindimensionalität und Integrabilität des Systems zurückzuführen ist [5].

Insgesamt ergibt sich für ein mögliches Stattfinden von Relaxationsprozessen in geschlossenen wechselwirkenden Quantensystemen kein einheitliches Bild, und theoretische Untersuchungen sind somit auf die Kenntnis des vollen N -Teilchenzustands angewiesen. Die Beschreibung solcher Quantenvielteilchensysteme ist allerdings komplex, besonders wenn starke, durch die Wechselwirkung hervorgerufene Nichtlinearitäten involviert sind. Numerisch exakte Rechnungen sind nur für eine sehr

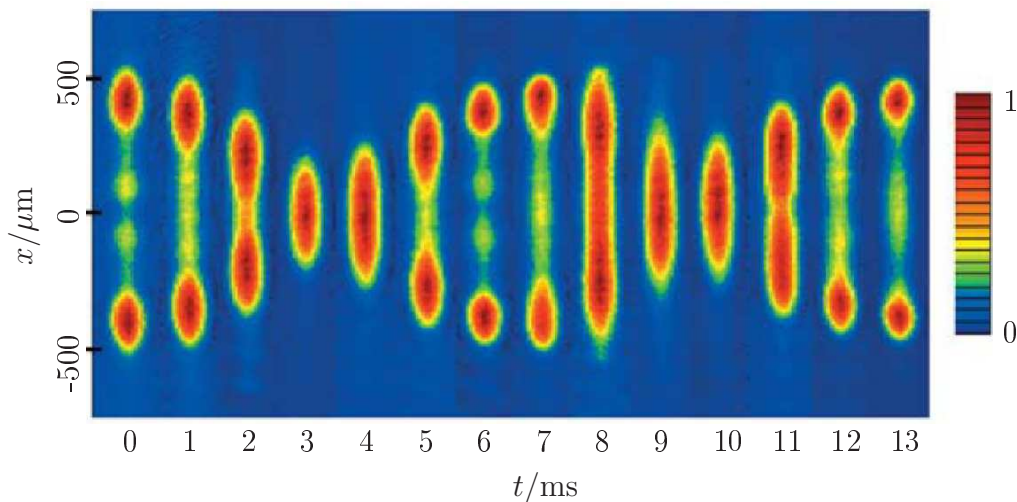


Abbildung 1.2: Experimentelle Realisierung eines Quantennewtonpendels (aus [5]): ultrakalte ^{87}Rb -Atome in einem optischen Gitter, die anfänglich aus dem Gleichgewicht gebracht wurden und sich anschließend in einer anharmonischen eindimensionalen Falle bewegen. Die Absorptionsbilder wurden in einem Abstand von einer Millisekunde aufgenommen. Die Farbkodierung steht für die normierte optische Tiefe.

kleine Anzahl von beteiligten Atomen möglich, so dass man auf Näherungen angewiesen ist. Eines der bedeutendsten theoretischen Werkzeuge auf dem Gebiet der ultrakalten Bosonen ist die Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE), die die Dynamik der Kondensatwellenfunktion bei Temperatur $T = 0$ bestimmt. Ihre Fähigkeit, Solitonen und Vortizes theoretisch zu beschreiben, lässt sie verbreitet Anwendung finden. Andererseits verhindert die ihr zugrunde liegende Molekularfeldnäherung die Möglichkeit, nicht-triviale Aussagen über den gesamten N -Teilchenzustand zu machen. So lassen sich etwa oben genannte Relaxationsprozesse nicht ohne Weiteres untersuchen, da die GPE einer Wellengleichung eines klassischen Feld entspricht und somit keine Quantenkorrelationen beinhaltet. Es bleibt also schwierig, für wechselwirkende Vielteilchen-Nichtgleichgewichtssysteme einen theoretischen Rahmen zu finden.

Um diese Lücke zu schließen, soll in der vorliegenden Arbeit die Anwendung semiklassischer Methoden auf Systeme ultrakalter, wechselwirkender Bosonen untersucht werden. Im Bereich der Semiklassik wird klassische Information, wie etwa die Wirkung, zur Bestimmung quantenmechanischer Eigenschaften genutzt. So können z.B. Energiespektren, Eigenfunktionen oder schlicht die Zeitentwicklung quantenmechanischer Systeme reproduziert werden. Die Anwendbarkeit semiklassischer Methoden ergibt sich aus der allgemeinen Forderung $\hbar \rightarrow 0$: Die involvierten Wirkungen müssen also groß verglichen mit \hbar sein. Für die hier diskutierten Quantenvielteilchensysteme folgt $N/\hbar \rightarrow \infty$ als Bedingung, was bei einer großen

Anzahl beteiligter Teilchen automatisch erfüllt ist. Zu wünschen wäre also ein semiklassischer Propagator, der in der Lage ist, die Zeitentwicklung eines vollen Feldes zu beschreiben.

Als Ausgangspunkt wird die Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelminimumpotential und im Drei-Topf-System untersucht. Für diese Systeme existieren einfache theoretische Beschreibungen, auf deren Basis die Dynamik der Quanten numerisch exakt zu bestimmen ist. Aus dem direkten Vergleich der Ergebnisse der semiklassischen Methoden mit den exakten lassen sich schließlich Aussagen über die Qualität der Näherungen treffen. Dies gilt insbesondere für das Doppelmuldensystem, das bereits von der Gruppe um Markus Oberthaler in Heidelberg realisiert wurde [4, 30] und somit experimentell gewonnene Daten für einen Vergleich zur Verfügung stellt.

Nach kurzen Vorbemerkungen leitet die vorliegende Arbeit in Kapitel 2 ein mit den theoretischen Grundlagen zur Bose-Einstein-Kondensation und den in diesem Zusammenhang üblicherweise zur Anwendung kommenden Methoden und Werkzeugen. Zur exakten theoretischen Beschreibung ultrakalter Bosonen im Rahmen der zweiten Quantisierung (Abschnitt 2.1) treten in Abschnitt 2.2 als Näherung die verbreitet angewendete Gross-Pitaevskii-Gleichung, sowie in Abschnitt 2.3 die Wigner-Darstellung.

Um über die Möglichkeiten der GPE hinausgehen zu können, kommt die vorliegende Arbeit in Kapitel 3 zu den semiklassischen Methoden, ihrem eigentlichen Thema. Nach der sogenannten WKB-Näherung (Abschnitt 3.1) erfolgt die Vorstellung des im weiteren zentralen semiklassischen Herman-Kluk-Propagators (Abschnitt 3.2). Mit der sogenannten “Truncated-Wigner-Approximation” wird in Abschnitt 3.3 eine Methode behandelt, die im weiteren Verlauf als Vergleich zur semiklassischen Propagation dienen soll.

Das zentrale Modellsystem dieser Arbeit wird in Kapitel 4 in Form des bosonischen Doppelminimumsystems eingeführt und in seiner experimentellen Realisierung diskutiert (Abschnitt 4.1). Für die bereits existierenden theoretischen Beschreibungen (4.2) lassen sich bekanntermaßen im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Theorie klassische Näherungen machen (Abschnitt 4.2.2). In Abschnitt 4.3 wird die überaus interessante Dynamik der Bosonen im Doppelmuldensystem erörtert, die gemäß dem Titel dieser Arbeit mithilfe der bereits eingeführten semiklassischen Methoden untersucht werden soll.

Ab Kapitel 5 erfolgt die Vorstellung der Ergebnisse, die auf analytischem Weg durch die Anwendung semiklassischer Verfahren erzielt werden konnten. Die Zusammenführung aus der Erörterung der WKB-Quantisierung (Abschnitt 5.1) und des aus der Molekülphysik bekannten Reflexionsprinzips (Abschnitt 5.2) mündet in einen geschlossenen analytischen Ausdruck für die Dynamik der Populationsdifferenz der Bosonen (Abschnitt 5.3). Aus einer Gegenüberstellung dieser Formel und

der numerisch exakten Ergebnisse in Kapitel 5.4 geht hervor, dass der gefundene Ausdruck eines der zentralen Ergebnisse der vorliegenden Arbeit darstellt [31].

Da die in der vorliegenden Arbeit angewendeten analytischen Methoden nur für den Fall der sogenannten Plasmaoszillationen Ergebnisse lieferten, wird in Kapitel 6 der Versuch unternommen, mithilfe der semiklassischen Herman-Kluk-Propagation im bosonischen Doppelminimumsystem auch noch den sogenannten “Self-Trapping-Bereich” theoretisch abzudecken. Die Ergebnisse werden den numerisch exakten, den klassischen Näherungen und denen aus der “Truncated-Wigner-Approximation” (TWA) gegenüber gestellt. Im Gegensatz zu den klassischen Gleichungen und zur TWA ist die semiklassische Propagation in der Lage, alle wichtigen Merkmale der Dynamik zu reproduzieren. Dies gilt nicht mehr nur noch für das Regime der Plasmaoszillationen, sondern auch für den zweiten vorhandenen Bereich des “Self-Trappings”.

Auf dem Weg zu dem selbst gesteckten Fernziel, ultrakalte Bosonen auf einem ausgedehnten optischen Gitter theoretisch zu beschreiben, wird in Kapitel 7 nach der bislang erfolgreichen Anwendung der semiklassischen Methoden nun das aus drei Potentialtöpfen bestehende und somit theoretisch schwerer fassbare System betrachtet. War die Dynamik der Bosonen schon in der Doppelmulde überaus interessant, so erweist sie sich in den drei Potentialtöpfen als noch komplexer. Auch hier wird der Versuch unternommen, über eine Gegenüberstellung von numerisch exakter Dynamik mit der aus der Literatur bekannten klassischen Dynamik, der TWA (Abschnitt 7.1.1) und der Herman-Kluk-Propagation (Abschnitt 7.1.2) zu Aussagen über die Qualität der semiklassischen Näherung zu kommen.

Eine Übersicht der erzielten Ergebnisse und deren Interpretation bietet das abschließende Kapitel. Darauf aufbauend werden Ideen und Anregungen zu Forschungsansätzen vorgestellt, die über die vorliegende Arbeit hinausweisen.

2 Theoretische Beschreibung eines Bose-Einstein-Kondensats

Im Folgenden soll ein phänomenologischer Einblick gegeben werden, was unter Bose-Einstein-Kondensation zu verstehen ist und unter welchen Umständen sie stattfinden kann. Dazu wird ein aus identischen Bosonen, also Teilchen mit ganzzahligem Spin, bestehendes Gas betrachtet. Für ein Quantengas der Temperatur T und einen damit verknüpften Impuls $p = \sqrt{2mkT}$ sagt die Heisenbergsche Unschärferelation vorher, dass der Aufenthaltsort eines einzelnen Quants über eine bestimmte Distanz unscharf ist, welche stark vereinfacht als die sogenannte thermische de-Broglie-Wellenlänge $\lambda_{dB} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{mkT}}$ angenommen werden kann, wobei \hbar das Plancksche Wirkungsquantum, m die Masse der Teilchen und k die Boltzmann-Konstante bezeichnet.

Solch ein Quantengas lässt sich bei Zimmertemperatur mithilfe der klassischen Boltzmann-Statistik beschreiben, die im Gegensatz zu der Quantenstatistik die Quanten als unterscheidbar betrachtet. Unter der Bedingung, dass die thermische Wellenlänge klein genug und der Abstand der Teilchen untereinander groß genug ist, sind die Quanten räumlich voneinander getrennt und somit einzeln zu identifizieren. Kühlen des Gases bewirkt eine Vergrößerung von λ_{dB} , so dass die Wellenpakete der Teilchen miteinander überlappen, sobald sich im Mittel mehr als ein Boson in einem Volumen λ_{dB}^3 befindet (siehe Abbildung 2.1). Nun sind die Atome nicht mehr voneinander zu unterscheiden, und das Gas muss für solche Temperaturen mithilfe der Quantenstatistik betrachtet werden. Der energetische Grundzustand wird makroskopisch besetzt: Man spricht von Bose-Einstein-Kondensation. Die Dichteverteilung des Kondensates wird wie ein klassisches Feld durch eine einzige komplexe Wellenfunktion mit wohldefinierter Amplitude und Phase beschrieben.

Der Übergang von ungeordneten zu kohärenten Materiewellen lässt sich mit dem Übergang von inkohärentem zu Laserlicht vergleichen und ist ein Phasenübergang, da z.B. die Grundzustandsbesetzung im thermodynamischen Limes, also für $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ aber $\frac{N}{V} = \text{konst.}$, in Abhängigkeit der Temperatur einen Knick aufweist. In den nächsten Abschnitten soll gezeigt werden, wie Bose-Einstein-Kondensation im idealen sowie im schwach wechselwirkenden Gas theoretisch beschrieben werden kann.

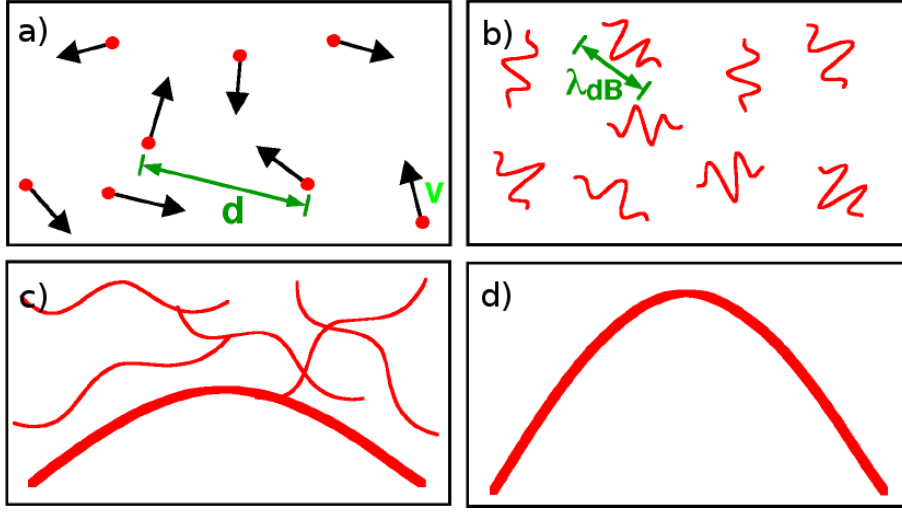


Abbildung 2.1: Einfache Darstellung von Bose-Einstein-Kondensation (aus [32]):

- a) Gas bei Raumtemperatur: kleine de-Broglie-Wellenlänge λ_{dB} im Vergleich zum mittleren Abstand d (grün) der Quanten untereinander. Die Quanten sind unterscheidbar und damit klassisch zu behandeln.
- b) Für sinkende Temperaturen wächst λ_{dB} (grün).
- c) An der kritischen Temperatur: λ_{dB} ist von der Größenordnung d , die Wellenpakete (rot) überlappen und Bose-Einstein-Kondensation setzt ein.
- d) Geht die Temperatur gegen null, entsteht eine makroskopische Materiewelle.

2.1 Das wechselwirkende Bose-Gas

Im Folgenden wird in Anlehnung an [33] ein Gas bestehend aus N Bosonen betrachtet, die untereinander wechselwirken. Diese Wechselwirkung soll zunächst möglichst allgemein durch das Wechselwirkungspotential $U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ beschrieben werden, wobei \mathbf{r}_i der Ort des i -ten Bosons ist. Der Hamiltonoperator setzt sich dann aus der Summe der kinetischen und, vorausgesetzt es gibt ein externes Potential, der potentiellen Energie $V(\mathbf{r}_i)$ der einzelnen Bosonen, sowie der Wechselwirkungsenergie zusammen

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + V(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}} U(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) . \quad (2.1)$$

Eine Methode zur quantenmechanischen Behandlung von Vielteilchenproblemen ist die zweite Quantisierung, bei der die Wellenfunktionen $\psi(\mathbf{r})$ der gewöhnlichen

Quantenmechanik zu quantisierten Feldoperatoren $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ werden, die für ein bosonisches Ensemble die bosonischen Vertauschungsrelationen erfüllen

$$[\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad [\hat{\psi}(\mathbf{r}), \hat{\psi}(\mathbf{r}')] = [\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}), \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}')] = 0 . \quad (2.2)$$

Im Rahmen der zweiten Quantisierung wird der Hamiltonoperator zu

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \int \left[-\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \hat{\psi}(\mathbf{r})|^2 + V(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} \\ &+ \frac{1}{2} \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') d\mathbf{r} d\mathbf{r}' . \end{aligned} \quad (2.3)$$

Die Feldoperatoren wurden bisher als zeitunabhängig, also im Schrödingerbild betrachtet. Deren Zeitentwicklung ist mithilfe des Wechsels in die Heisenbergdarstellung gegeben durch die exakte Gleichung

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) &= [\hat{\psi}(\mathbf{r}, t), \hat{H}] \\ &= \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}', t) U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) , \end{aligned}$$

was durch Einsetzen des Vielteilchen-Hamiltonoperators (2.3) und der Vertauschungsrelationen des Feldoperators (2.2) leicht nachvollziehbar ist.

Da die Behandlung dieser Gleichung im Allgemeinen durch den nichtlinearen Wechselwirkungsterm kompliziert ist, soll an dieser Stelle die Art der Wechselwirkung zwischen den Atomen in ultrakalten bosonischen Gasen betrachtet werden. Aufgrund der niedrigen Temperatur der Bosonen und der daher sehr langsam stattfindenden Stöße ergibt sich aus der Streutheorie [14], dass für die Wechselwirkung der Atome untereinander nur die sogenannte s-Wellenstreuung von Belang ist. Dieser entspricht der Streuquerschnitt

$$\sigma = 8\pi a^2 , \quad (2.4)$$

solange identische Teilchen an den Stößen beteiligt sind, wobei die Streulänge a als eine effektive Reichweite des Wechselwirkungspotentials zu interpretieren ist. Da diese bei schwach wechselwirkenden verdünnten Gasen um Größenordnungen kleiner ist als der mittlere Abstand zwischen den einzelnen Atomen, kann das effektive Potential der Wechselwirkung durch eine Kontaktwechselwirkung dargestellt werden

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.5)$$

wobei \mathbf{r} und \mathbf{r}' die Aufenthaltsorte der zwei wechselwirkenden Atome bezeichnen. Aus der Streutheorie ergibt sich für ein bosonisches Gas im Dreidimensionalen die Kopplungskonstante

$$g = \frac{4\pi\hbar^2 a}{m} , \quad (2.6)$$

so dass mit der Kontaktwechselwirkung (2.5) die Relation (2.4) sichergestellt ist. Einsetzen der Delta-Funktion (2.5) in die Zeitentwicklung des Feldoperators (2.4) und Durchführen der Integration liefert

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + g \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}, t) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \right) \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) . \quad (2.7)$$

Diese Gleichung beschreibt die Zeitentwicklung des vollen Feldes eines ultrakalten Bose-Gases exakt, ist aber durch die Operatorwertigkeit in der Anwendung unpraktisch. Im folgenden Abschnitt soll daher gezeigt werden, wie die Gleichung zur Gross-Pitaevskii-Gleichung approximiert werden kann.

Im Zusammenhang mit den in der Einleitung erwähnten ultrakalten bosonischen Systemen in optischen Gittern ist der Vielteilchen-Hamiltonoperator (2.3) ebenfalls stark zu vereinfachen. Dafür werden die Feldoperatoren in Einteilchen-Wellenfunktionen $\varphi_i(\mathbf{r})$ der beteiligten Moden entwickelt

$$\begin{aligned} \hat{\psi}(\mathbf{r}) &= \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \hat{c}_i \\ \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \hat{c}_i^\dagger . \end{aligned}$$

Die Operatoren \hat{c}_i und \hat{c}_i^\dagger sind die Vernichtungs- und Erzeugungsoperatoren für ein Teilchen in der i -ten Mode. Sie genügen den bosonischen Kommutationsrelationen mit $[\hat{c}_i, \hat{c}_j^\dagger] = \delta_{ij}$ und $[\hat{c}_i, \hat{c}_j] = [\hat{c}_i^\dagger, \hat{c}_j^\dagger] = 0$. Weiterhin ist der Erwartungswert dieser Operatoren mit der Teilchenzahl in der i -ten Eigenmode n_i durch $\langle \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i \rangle = \delta_{ij} n_i$ gegeben [33].

In den ultrakalten Gitteranordnungen nun ist davon auszugehen, dass sich die Atome im niedrigsten Energieband befinden, was zu dem berühmten Bose-Hubbard-Hamiltonian führt [23]

$$\hat{H}_{BH} = -T \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + U \sum_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j \hat{c}_j + \sum_j \epsilon_j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_j . \quad (2.8)$$

Hier stehen \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i für die Erzeuger bzw. Vernichter eines Teilchens im i -ten Potentialtopf im Gitter. Der erste Teil des Hamiltonoperators steht für das Tunneln der Atome zwischen den Potentialtöpfen, wobei bereits davon ausgegangen wurde, dass gegenüber dem Tunneln zwischen benachbarten Töpfen Tunneleffekte

höherer Ordnung zu vernachlässigen sind (dies soll die Summe über $\langle i, j \rangle$ bezeichnen). Der Tunnelparameter T hängt mit der Barrierenhöhe zwischen den Potentialen zusammen und ist somit experimentell relativ leicht zu kontrollieren. Er wird in [23] näher diskutiert. Der zweite Term im Bose-Hubbard-Hamiltonian ist der Wechselwirkung zuzuschreiben. Auch hier ist die Wechselwirkung von Atomen, die in unterschiedlichen Potentialtöpfen lokalisiert sind, gegenüber der im selben Topf stattfindenden zu vernachlässigen. Der Parameter U hängt wieder mit dem s -Wellenstreuquerschnitt (2.4) zusammen und wird ebenfalls in [23] genauer erläutert. Der dritte Term findet seinen Ursprung im externen Fallenpotential.

Das Bose-Hubbard-Modell im Allgemeinen berücksichtigt beliebig viele Potentialtöpfe und ist eng verwandt mit dem Hubbard-Modell aus der Festkörperphysik, das näherungsweise supraleitende Systeme und die Bewegung von Elektronen im Festkörper beschreibt. Nach Bose ist es benannt, weil es die Dynamik von Bosonen beschreibt, die im Prinzip jeden Gitterplatz im Potentialgitter mehrfach besetzen können. Dies gilt nicht für Fermionen, die einen Quantenzustand nur einfach besetzen. Das Bose-Hubbard-Modell wurde unter anderem erfolgreich zur Beschreibung von Suprafluiden [34] herangezogen, im Speziellen zur Darstellung des berühmten Phasenübergangs von einer Supraflüssigkeit zum Mott-Isolator, siehe z.B. [35, 36] und die Referenzen darin.

Durch das Bose-Hubbard-Modell ist ein einfacher theoretischer Rahmen gegeben, die Dynamik ultrakalter Bosonen in optischen Gittern zu beschreiben. Es dient unter anderem als Basis dafür, die in der Einleitung erwähnten Relaxationsprozesse in solchen Systemen zu untersuchen, und im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit wird es Anwendung finden in Bezug auf das Doppelmuldensystem und das Drei-Topf-System. Für beliebige Fallengeometrien hingegen ist es nicht heranzuziehen, so dass üblicherweise andere Näherungen vorgenommen werden müssen, unter denen die im folgenden Abschnitt vorgestellte Gross-Pitaevskii-Gleichung eine große Rolle spielt.

2.2 Die Gross-Pitaevskii-Gleichung

Die Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE) ist eines der wichtigsten Werkzeuge in der theoretischen Behandlung von Bose-Einstein-Kondensaten und deren Dynamik. Sie wurde 1961 gleichzeitig von Gross [37, 38] und Pitaevskii [39] ausgehend vom Feldoperator (2.8) und dessen Zeitentwicklung (2.7) hergeleitet. In diesem Zusammenhang ist die Wellenfunktion des Grundzustandes von zentraler Bedeutung, die sogenannte Kondensatwellenfunktion. Da der Grundzustand bei Eintreten von Bose-Einstein-Kondensation makroskopisch besetzt ist, lässt sich die Nichtkommutativität der Operatoren der Grundmode vernachlässigen. Deutlich wird dies daran, dass die Operatoren der Größenordnung $\sqrt{N_0}$ sind, wohingegen deren Kommu-

tator gleich eins ist. N_0 bezeichnet die Teilchenzahl der Atome im Grundzustand. Für große Teilchenzahlen können die Operatoren also ersetzt werden durch $\sqrt{N_0}$ multipliziert mit einem Phasenfaktor. Die makroskopische Komponente des Feldoperators wird somit als ein (zeitabhängiges) klassisches Feld behandelt, wohingegen alle weiteren Moden durch operatorwertige Quantenfluktuationen ausgedrückt werden

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) = \psi_0(\mathbf{r}, t) + \delta\hat{\psi}(\mathbf{r}, t) ,$$

mit dem Erwartungswert des Feldoperators

$$\langle \hat{\psi}(\mathbf{r}, t) \rangle = \psi_0(\mathbf{r}, t) .$$

In verdünnten Bose-Gasen bei extrem niedrigen Temperaturen können die nicht-kondensierte Komponente und somit die Fluktuationen vernachlässigt werden, und der Feldoperator wird zu einem klassischen Feld, nämlich der Kondensatwellenfunktion ψ_0 . Das Ersetzen der Operatoren in (2.7) mit ψ_0 führt zu der berühmten zeitabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung (GPE), die die Zeitentwicklung der klassischen Kondensatwellenfunktion beschreibt

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_0(\mathbf{r}, t) = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + g|\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2 \right) \psi_0(\mathbf{r}, t) . \quad (2.9)$$

Die GPE hat die Form einer Schrödingergleichung für ein klassisches Feld, in der die potentielle Energie die Summe aus externem Potential und einem nichtlinearen Term $g|\psi_0(\mathbf{r}, t)|^2$ ist, der wiederum der Wechselwirkung zuzuschreiben ist und das von den anderen Atomen erzeugte mittlere Feld beschreibt. Da die GPE eine Gleichung für den Erwartungswert des Feldoperators unter Vernachlässigung der Fluktuationen ist, lassen sich mit ihr keine nicht-trivialen Aussagen über den vollen N-Teilchenzustand machen, was je nach Fragestellung ein Problem sein kann. Darauf soll in Abschnitt 4.2.2 in Bezug auf das Doppelmuldensystem eingegangen werden.

Für explizit zeitunabhängige externe Potentiale $V(\mathbf{r})$ setzt sich eine stationäre Wellenfunktion $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ aus einem zeit- und einem ortsabhängigen Teil zusammen. Das Einsetzen des Ansatzes

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = e^{-\frac{i\mu t}{\hbar}} \psi_0(\mathbf{r})$$

in die zeitabhängige Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.9) führt zur zeitunabhängigen Gross-Pitaevskii-Gleichung

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g|\psi_0(\mathbf{r})|^2 \right) \psi_0(\mathbf{r}) = \mu \psi_0(\mathbf{r}) . \quad (2.10)$$

Diese ähnelt von der Form her der stationären Schrödingergleichung. Der Eigenwert ist das chemische Potential μ , das die Zeitabhängigkeit festlegt und gleich der Energie pro Teilchen ist.

2.3 Wigner-Darstellung

Nachdem die GPE lediglich die Zeitentwicklung des Erwartungswerts des Feldoperators bestimmt, lässt sich die Dynamik des vollen N -Bosonenzustandes mithilfe des Wigner-Moyal-Zugangs theoretisch beschreiben, wie es 1998 von Steel et al. vorgeschlagen wurde [40]. In diesem Rahmen wird die Zeitentwicklung der Wigner-Verteilung eines Quantenzustandes beschrieben, der durch seinen Dichteoperator $\hat{\rho}$ charakterisiert ist. Im Folgenden wird in Anlehnung an [41, 42] die Wigner-Quasi-Wahrscheinlichkeitsverteilung für ultrakalte Bosonen und deren Zeitentwicklung diskutiert.

Die Fouriertransformierte einer klassischen Wahrscheinlichkeitsverteilung ist die sogenannte charakteristische Funktion, deren Ableitungen proportional zu den Momenten der Verteilung sind [42]. Dies kann auf ein System verallgemeinert werden, welches mithilfe seines Quantendichteoperators $\hat{\rho}$ für ein quantenmechanisches Feld $\hat{\psi}(\mathbf{r})$ dargestellt wird. Dessen charakteristisches Funktional ist

$$\chi[\phi, \phi^*] = \text{tr} \left[\hat{\rho} \exp \left(\int d\mathbf{r} \left[\phi(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) - \phi^*(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right] \right) \right], \quad (2.11)$$

mit $\phi(\mathbf{r})$ als komplexem Feld und den aus dem vorangegangenen Abschnitt bekannten Feldoperatoren. Die Fouriertransformierte dieses charakteristischen Funktionals (2.17) ist die 1932 von Wigner eingeführte Wignerverteilung [43]

$$W[\psi, \psi^*] = \frac{1}{\pi^2} \int D^2[\phi] \chi[\phi, \phi^*] \exp \left[\int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) - \phi(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) \right], \quad (2.12)$$

die in diesem Zusammenhang ein Funktional des dem Feldoperator entsprechenden klassischen komplexen Feldes $\psi(\mathbf{r})$ ist. Analog zu Abschnitt 2.1 kann dieses komplexe Feld in Einteilchen-Moden $\varphi_i(\mathbf{r})$ entwickelt werden

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \alpha_i,$$

wobei die α_i die komplexen Amplituden der jeweiligen hoch besetzten Moden darstellen. Im Unterschied zu Abschnitt 2.2 ist hier hingegen nicht nur die Grundzustandsmode besetzt.

Ursprünglich diene die Wignerfunktion zur orts- und impulsabhängigen Phasenraumdarstellung eines Quantenzustandes. Da sie auch negative Werte annehmen kann, ist sie allerdings keine Wahrscheinlichkeitsverteilung im klassischen Sinne, sondern wird Quasi-Wahrscheinlichkeitsverteilung genannt. Das Auftreten negativer Werte ist charakteristisch für einen nichtklassischen Quantenzustand.

Im Rahmen des Wigner-Moyal-Zugangs folgt die Zeitentwicklung der Wignerverteilung durch Einsetzen der Zeitentwicklung des Dichteoperators [42, 44], also der von-Neumann-Gleichung

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}, \hat{\rho}(t)] . \quad (2.13)$$

Der hier eingehende Hamiltonoperator ist der Vielteilchen-Hamiltonian (2.1) für ultrakalte Bosonen. Für diesen ergibt sich nach den Überlegungen des vorangegangenen Abschnitts 2.1

$$\hat{H} = \int d\mathbf{r} \left[-\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) + \frac{g}{2} \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \right] . \quad (2.14)$$

Nach Einsetzen desselben in (2.13) und in die Zeitableitung der Wignerfunktion (2.12) folgt nach einigen Rechnungen [42] schließlich für die Zeitentwicklung der Wignerfunktion eine funktionale Differentialgleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} W[\psi, \psi^*] &= \int d\mathbf{r} \left[\frac{i}{\hbar} \frac{\delta}{\delta \psi(\mathbf{r})} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) + g(|\psi(\mathbf{r})|^2 - \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r})) \right) \psi(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. + \text{h.c.} + \frac{ig}{4\hbar} \frac{\delta^2}{\delta \psi(\mathbf{r}) \delta \psi^*(\mathbf{r})} \psi^*(\mathbf{r}) \frac{\delta}{\delta \psi^*(\mathbf{r})} + \text{h.c.} \right] W[\psi, \psi^*] . \end{aligned} \quad (2.15)$$

Die darin auftretenden Ableitungsoperatoren können geschrieben werden [42] als

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \psi(\mathbf{r})} &= \sum_i \varphi_i^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \alpha_i} \\ \frac{\delta}{\delta \psi^*(\mathbf{r})} &= \sum_i \varphi_i(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial \alpha_i^*} , \end{aligned}$$

und das h.c. steht für das hermitesch Konjugierte. Die Gleichung (2.15) ist allerdings aufgrund der Ableitungen dritter Ordnung sehr schwer zu lösen, so dass Näherungen gemacht werden müssen. Gewöhnlich wird die sogenannte “Truncated Wigner Approximation” vorgenommen, die im anschließenden Kapitel 3 vorgestellt wird.

Schließlich soll noch der für den weiteren Verlauf dieser Arbeit interessante Fall von wenigen besetzten Moden vorgestellt werden. Hier sind die charakteristische

Funktion (2.11) und die Wignerfunktion (2.12) keine Funktionale mehr, sondern Funktionen

$$W(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\alpha}^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\boldsymbol{\lambda} e^{\boldsymbol{\lambda}^* \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\lambda} \boldsymbol{\alpha}^*} \chi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}^*) \quad (2.16)$$

$$\chi(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\lambda}^*) = \text{tr} \left[\hat{\rho} e^{\boldsymbol{\lambda} \hat{a}^\dagger - \boldsymbol{\lambda}^* \hat{a}} \right] , \quad (2.17)$$

mit $\boldsymbol{\lambda}$ als komplexem Vektor und den Operatoren \hat{a}^\dagger und \hat{a} als Erzeugern und Vernichtern der einzelnen Moden. Dieser Sonderfall ist im Zusammenhang mit dem bereits vorgestellten Bose-Hubbard-Hamiltonian (2.8) von Bedeutung, für dessen Anwendbarkeit davon auszugehen ist, dass nur die wenigen niedrigsten Moden besetzt sind.

3 Semiklassische Methoden

Wie bereits in der Einleitung diskutiert, macht die theoretische Beschreibung von Relaxationsprozessen in Quantenvielteilchensystemen Probleme: Es ist das volle N -Teilchenproblem zu lösen. Um auf diesem Gebiet Fortschritte zu machen, soll es das Ziel der vorliegenden Arbeit sein, die Anwendung semiklassischer Methoden auf ultrakalte bosonische Systeme zu untersuchen, deren Konzepte im Folgenden vorgestellt werden. Im Allgemeinen ist unter Semiklassik zu verstehen, dass nur ein Teil der Beschreibung des Systems quantenmechanisch erfolgt, der andere Teil jedoch auf der klassischen Physik beruht. Auf diesem Weg kann z.B. die klassische Dynamik genutzt werden, um Quanteneigenschaften, wie beispielsweise die quantenmechanische Phase $e^{\frac{i}{\hbar}S_{\text{kl}}}$ (wobei S_{kl} die klassische Wirkung bezeichnet), zu bestimmen. Semiklassische Näherungen sind in der Regel gut, wenn \hbar gegen null geht, bzw. wenn die involvierten Wirkungen sehr groß im Vergleich zu \hbar werden. Betrachtet man nochmals den Vielteilchenhamiltonoperator für ultrakalte Bosonen (2.14) aus dem vorangegangenen Kapitel, und normiert die darin enthaltenen Feldoperatoren auf die Teilchenzahl gemäß $\hat{\Phi} := \frac{1}{\sqrt{N}}\hat{\psi}$, so erhält man

$$\hat{H} = N \int d\mathbf{r} \left[-\hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\Phi}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Phi}(\mathbf{r}) + \frac{gN}{2} \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Phi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Phi}(\mathbf{r}) \hat{\Phi}(\mathbf{r}) \right], \quad (3.1)$$

mit

$$[\Phi, \Phi^\dagger] = \frac{1}{N}.$$

Aus dem Ausdruck geht hervor, dass für solch ein ultrakaltes bosonisches System semiklassische Methoden eine gute Näherung liefern, wenn das Verhältnis N/\hbar gegen unendlich geht, also wieder, wenn \hbar gegen null geht, aber eben auch, wenn die Teilchenzahl sehr groß wird bzw. gegen unendlich geht. Dieser Fall ist für die vorliegende Arbeit von großer Bedeutung, da hier stets Systeme mit großen Gesamtteilchenzahlen betrachtet werden, so dass die Größe von \hbar irrelevant wird.

Wird nun das Produkt gN im Hamiltonoperator (3.1) konstant gehalten, so wird der gesamte Ausdruck im Integral unabhängig von der Teilchenzahl. Genau dieser Grenzfall ist für Systeme aus ultrakalten verdünnten Gasen interessant, da diese in der Regel aus vielen Teilchen bestehen, die nur schwach miteinander wechselwirken. Die Anwendung semiklassischer Methoden auf solche Systeme erweist sich also im Allgemeinen als vielversprechend. So wurde z.B. der Zusammenhang zwi-

schen der WKB-Näherung für die Schrödingergleichung und dem Vielteilchenlimes von Modellen, in denen nur wenige Moden berücksichtigt werden, gezeigt [45]. Auf dieses Modell wird in Kapitel 5 näher eingegangen werden.

In diesem Kapitel sind die semiklassischen Methoden vorzustellen, die in der vorliegenden Arbeit Anwendung finden sollen. Im Abschnitt 3.1 wird die WKB-Quantisierung eingeführt, gefolgt von der Einführung semiklassischer Propagatoren in Abschnitt 3.2.

3.1 Semiklassische Quantisierung

Die Geschichte der semiklassischen Quantisierung beginnt mit Niels Bohr, der 1913 sein berühmtes Atommodell vorstellte [46]. Zuvor hatte Rutherford in der Folge seiner Streuversuche [47] ein Atommodell entwickelt, in dem ein kleiner positiv geladener Kern von einer Wolke aus Elektronen umgeben ist. Bohr vermutete, dass die Elektronen Kreisbewegungen um den Kern beschreiben. Um die Stabilität dieser Bahnen zu erklären, postulierte er für den Drehimpuls der Elektronen ein ganzzahliges Vielfaches des Planckschen Wirkungsquantums \hbar und damit quantisierte Elektronenenergien. Mithilfe des Modells konnte er die bis dato nur experimentell bekannten Absorptionslinien des Wasserstoffatoms erschließen. Zusammen mit Sommerfeld verallgemeinerte er seine Theorie [48], indem vom quantisierten Drehimpuls zur Quantisierung des Wirkungsintegrals S entlang einer geschlossenen Bahn übergegangen wurde

$$S(E) = \oint \mathbf{p} d\mathbf{r} = 2\pi\hbar n ,$$

mit der Quantenzahl n . Da die Wirkung von der Energie der Elektronen abhängt, folgt wieder eine Quantisierung in der Energie.

Die bahnbrechenden Fortschritte in der Quantentheorie der 20er Jahre versetzten nahezu zeitgleich Wentzel, Kramers und Brillouin [49, 50, 51] in die Lage, die Bohr-Sommerfeld-Quantisierung mithilfe einer semiklassischen Entwicklung aus der Schrödingergleichung herzuleiten und auf die Erfassung der Wellenfunktionen zu erweitern [52]. Deren semiklassischer Charakter offenbart sich an der zentralen Rolle der Wirkung. Die erste Ordnung der Entwicklung in \hbar liefert die Quantenkorrekturen und semiklassischen Wellenfunktionen. Die nach diesen Autoren benannte WKB-Quantisierungsvorschrift in einer Dimension ist

$$\oint p dx = 2\pi\hbar(n + \text{konst}) .$$

Die Konstante des Ausdrucks hängt ab von der Art der Reflexion im Potential. Mit einem Wert von $1/2$ ließ sich z.B. die bislang fehlende Nullpunktenergie des harmonischen Oszillators einführen. Im Allgemeinen nimmt der Grad an Genauigkeit, die mit der WKB-Quantisierung zu erzielen ist, mit steigender Quantenzahl n zu [53]. Diese Proportionalität entspricht dem Bohrschen Korrespondenzprinzip, nach dem die Quantenmechanik im Grenzfall großer Quantenzahlen in die klassische Mechanik übergeht.

3.2 Semiklassische Propagatoren

Neben der WKB-Quantisierung, die Aussagen über Energiespektren und Wellenfunktionen macht, ist in der semiklassischen Physik das Beschreiben von Dynamik mithilfe semiklassischer Propagatoren von großer Bedeutung. Dabei wird der quantenmechanische Propagator unter Einbeziehung klassischer Trajektorien und einer quantenmechanischen Phase genähert. Diese Konstruktion quantenmechanischer Amplituden auf der Basis klassischer Dynamik wird bildlich gesprochen auch als “Auffüllen des klassischen Skeletts mit quantenmechanischem Fleisch” bezeichnet [54]. Die semiklassische Näherung des Propagators geht auf van Vleck zurück [55, 56] und wurde fast 40 Jahre später von Gutzwiller verallgemeinert [57]. Im folgenden Abschnitt 3.2.1 wird die Herleitung des van Vleck-Gutzwiller-Propagators (VVG) diskutiert, und daran anschließend in Abschnitt 3.2.2 der Herman-Kluk-Propagator (HK) eingeführt, der anders als der VVG-Propagator in Anfangswertdarstellung gegeben ist.

3.2.1 Der van Vleck-Gutzwiller-Propagator

Die Herleitung des VVG-Propagators wird im Folgenden in Anlehnung an [55] skizziert. Ausgangspunkt ist der quantenmechanische Propagator in Ortsdarstellung. Die Zeitentwicklung einer Wellenfunktion $|\psi(t)\rangle$ mit einem Hamiltonoperator \hat{H} wird bekanntermaßen durch die Schrödingergleichung bestimmt

$$i\hbar|\dot{\psi}(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle .$$

Ist der Hamiltonoperator zeitunabhängig, so ist die formale Lösung der Gleichung gegeben durch

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle =: \hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle , \quad (3.2)$$

wobei hier der Zeitentwicklungsoperator $\hat{U}(t, 0)$, oder auch Propagator, definiert wurde, welcher die Wellenfunktion von der Zeit $t_0 = 0$ bis zur Zeit t entwickelt. Stellt man die Wellenfunktion im Ort dar, so ergibt sich

$$\psi(\mathbf{r}_f, t) = \int d\mathbf{r}_i \underbrace{\langle \mathbf{r}_f | \hat{U}(t, 0) | \mathbf{r}_i \rangle}_{K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0)} \psi(\mathbf{r}_i, 0) .$$

Das Ortsmatrixelement des Zeitentwicklungsoperators $K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0)$ im Integral kann als Wahrscheinlichkeitsamplitude dafür interpretiert werden, dass ein Teilchen vom Ort \mathbf{r}_i zum Zeitpunkt $t = 0$ in der Zeit t zum Ort \mathbf{r}_f propagiert. Im Folgenden soll eine semiklassische Näherung für $K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0)$ hergeleitet werden, indem von der Pfadintegral-Darstellung des Propagators gestartet wird, wie es in [58] beschrieben ist. Die Darstellung geht auf Feynman zurück [59], der durch ein Buch von Dirac inspiriert worden war. Feynman drückte den Propagator über eine Summe über alle möglichen – auch nichtklassischen – Pfade vom anfänglichen Ort \mathbf{r}_i zum finalen Ort \mathbf{r}_f in der Zeit t aus, wobei jeder dieser Pfade mit einem Phasenfaktor zu der Summe beiträgt. Diese Phase ist das Verhältnis der klassischen Wirkung S , die von dem jeweiligen Pfad abhängt, und dem Planckschen Wirkungsquantum \hbar

$$K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0) = \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_i}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}_f} D[\mathbf{r}] e^{\frac{i}{\hbar} S[\mathbf{r}]} . \quad (3.3)$$

Das Funktionalintegral $\int D[\mathbf{r}]$ bezeichnet das Integral über alle möglichen Wege, und das Wirkungsfunktional ist das Zeitintegral der klassischen Lagrangefunktion

$$S[\mathbf{r}] = \int_0^t dt' L(\dot{\mathbf{r}}(t'), \mathbf{r}'(t'), t') = \int_0^t dt' [\mathbf{p}(t') \dot{\mathbf{r}}(t') - H(\mathbf{p}(t'), \mathbf{r}(t'), t')] . \quad (3.4)$$

Eine exakte analytische Berechnung des Pfadintegrals (3.3) ist nur für wenige Ausnahmefälle möglich [60], so dass weitere Näherungen erforderlich sind. Im Zuge der semiklassischen Näherung wird eine sogenannte stationäre Phasenapproximation durchgeführt. Für $\hbar \rightarrow 0$, bzw. für große Wirkungen im Verhältnis zu \hbar oszilliert der Integrand stark, so dass sich die Terme im Integral gegenseitig auslöschen. Zum Integral tragen nur die Stellen bei, an denen die Oszillation am schwächsten ist: die Extremstellen. Daher wird der Exponent im Pfadintegral um den klassischen Pfad herum bis zur zweiten Ordnung entwickelt, weil für diesen gemäß dem Hamiltonschen Prinzip die Wirkung minimal wird. Die erste Ableitung verschwindet an der Extremstelle, und das Integral kann unter Vernachlässigung der höheren Ordnungen analytisch ausgewertet werden. Der Hauptbeitrag zum Propagator in der stationären Phasennäherung ist somit dem klassischen Pfad zuzuschreiben, der das den Integrationsgrenzen im Propagator zugrunde liegende Randwertproblem löst. Zusätzlich trägt ein schmaler Bereich um den klassischen Pfad herum bei. Die stationäre Phasenapproximation wird in diesem Zusammenhang auch semiklassi-

sche Näherung genannt. Nach einigen Umformungen [57] erhält man schließlich den VVG-Propagator

$$K_{\text{VVG}}(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0) = \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \right)^{N/2} \sum_k \left[\det \left(\frac{\partial^2 S_k}{\partial \mathbf{r}_f \partial \mathbf{r}_i} \right) \right]^{1/2} e^{\frac{i}{\hbar} S_k - i \frac{\pi \nu}{2}} , \quad (3.5)$$

mit N als Dimension des zugrunde liegenden physikalischen Problems und S_k als Wirkung des klassischen Pfades. Zur Herleitung von (3.5) wurden mehrere mögliche klassische Bahnen berücksichtigt, so dass laut dem Superpositionsprinzip der Quantenmechanik über die k existenten klassischen Pfade summiert wird. Weiterhin führte Guzwiller einen zusätzlichen Phasenfaktor $i\pi\nu/2$ – mit dem sogenannten Maslovindex ν – ein. Dieser zählt die konjugierten Punkte, also die Stellen, an denen die Van Vleck-Determinante $\det \left(\frac{\partial^2 S_k}{\partial \mathbf{r}_f \partial \mathbf{r}_i} \right) = \det \left(-\frac{\partial \mathbf{p}_i}{\partial \mathbf{r}_f} \right)$ divergiert, im Eindimensionalen die Umkehrpunkte im Phasenraum. Der Vorfaktor ist offensichtlich das Inverse der Sensitivität des finalen Ortes \mathbf{r}_f von der Wahl des anfänglichen Impulses \mathbf{p}_i [54]. Je größer die Sensitivität, desto größer wird der Ausdruck $\left(\frac{\partial \mathbf{r}_f}{\partial \mathbf{p}_f} \right)^{-1}$, so dass das Gewicht einer solchen Trajektorie im Propagator klein wird.

Dieser endgültige Ausdruck des semiklassischen Propagators (3.5) besteht aus einer Summe über alle klassischen Pfade und beinhaltet automatisch die Beschreibung von quantenmechanischen Interferenzeffekten, da jeder klassische Pfad mit einer unterschiedlichen Phase beiträgt. Trotzdem ist der Propagator elegant und sehr intuitiv, beruht er doch lediglich auf klassischen Trajektorien. Von Nachteil ist hingegen, dass dem VVG-Propagator ein klassisches Randwertproblem zugrunde liegt. Zur Berechnung des Vorfaktors muss eine unter Umständen aufwendige Nullstellensuche durchgeführt werden, die besonders für Systeme mit einer großen Anzahl von Freiheitsgraden mit extrem hohem rechnerischem Aufwand verbunden ist. Daher ist eine Variation des VVG-Propagators in Anfangswertdarstellung von großem Interesse, welche im folgenden Abschnitt eingeführt werden soll.

3.2.2 Der Herman-Kluk-Propagator

Großmann folgend [55] ist die Grundlage zur Umformulierung des semiklassischen Propagators das Matrixelement des Zeitentwicklungsoperators aus (3.2) zwischen den besonders aus der Quantenoptik bekannten kohärenten Zuständen $|\mathbf{z}\rangle$

$$K(\mathbf{z}_f, t; \mathbf{z}_i, 0) = \langle \mathbf{z}_f | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{z}_i \rangle ,$$

die mithilfe von Ort und Impuls auch darzustellen sind als

$$\mathbf{z} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{q} + i\mathbf{p}) .$$

Die kohärenten Zustände sind in Diracschreibweise auch auszudrücken als

$$|\mathbf{z}\rangle = e^{-1/2|\mathbf{z}|^2} e^{\mathbf{z}\hat{\mathbf{a}}^\dagger} |0\rangle, \quad (3.6)$$

wobei $|0\rangle$ der Grundzustand N ungekoppelter harmonischer Oszillatoren ist, und der entsprechende Aufsteigeoperator $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ über Ort- und Impulsoperator ausgedrückt werden kann. Die kohärenten Zustände sind außerdem Eigenzustände des dazugehörigen Vernichtungsoperators $\hat{\mathbf{a}}$.

Betrachtet wird nun wieder der Zeitentwicklungsoperator in der Ortsdarstellung, welcher mithilfe der kohärenten Zustände zu schreiben ist als

$$K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0) = \int \frac{d^N p_f d^N q_f}{(2\pi\hbar)^N} \int \frac{d^N p_i d^N q_i}{(2\pi\hbar)^N} \langle \mathbf{r}_f | \mathbf{z}_f \rangle \langle \mathbf{z}_f | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{z}_i \rangle \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{r}_i \rangle. \quad (3.7)$$

Dabei konnten die kohärenten Zustände aufgrund ihrer (Über-)Vollständigkeit eingeschoben werden

$$\mathbb{1} = \int \frac{d^N p d^N q}{(2\pi\hbar)^N} |\mathbf{z}\rangle \langle \mathbf{z}|.$$

Das Matrixelement des Zeitentwicklungsoperators zwischen den kohärenten Zuständen in (3.7) wird im nächsten Schritt durch dessen semiklassische Näherung ersetzt, die analog zur Bestimmung des VVG-Propagators ausgehend von der Pfadintegraldarstellung des Propagators erfolgt. Zudem wird die Integration über den finalen Phasenraum in der stationären Phasenapproximation ausgeführt [61], so dass sich letztlich ein Ausdruck ergibt, der lediglich klassische Anfangswertlösungen enthält: der Herman-Kluk-Propagator

$$K_{\text{HK}}(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0) = \int \frac{d^N p_i d^N q_i}{(2\pi\hbar)^N} \langle \mathbf{r}_f | \mathbf{z}(t) \rangle R(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t)\right) \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{r}_i \rangle, \quad (3.8)$$

welcher zuerst 1984 von Herman und Kluk erdacht wurde [62]. \mathbf{q}_i und \mathbf{p}_i kennzeichnen die Phasenraumvariablen, deren zeitliche Entwicklung aus den klassischen hamiltonschen Bewegungsgleichungen folgt. $S(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t)$ steht wieder für die klassische Wirkung (3.4), die hier von den anfänglichen Phasenraumvariablen abhängt. $R(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t)$ ist der komplexe Herman-Kluk-Vorfaktor

$$R(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t) = \det \left[\frac{1}{2} \left(\mathbf{m}_{11} + \mathbf{m}_{22} - i\hbar\gamma\mathbf{m}_{21} - \frac{1}{i\hbar\gamma}\mathbf{m}_{12} \right) \right]^{1/2}, \quad (3.9)$$

der die Elemente der Monodromiematrix

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \mathbf{m}_{11} & \mathbf{m}_{12} \\ \mathbf{m}_{21} & \mathbf{m}_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{p}_i^T} & \frac{\partial \mathbf{p}(t)}{\partial \mathbf{q}_i^T} \\ \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{p}_i^T} & \frac{\partial \mathbf{q}(t)}{\partial \mathbf{q}_i^T} \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

enthält. Diese Monodromiematrix, oder auch Stabilitätsmatrix, ist ähnlich wie der VVG-Vorfaktor ein Maß für die Stabilität einer Trajektorie. Sie bestimmt die Zeitentwicklung einer anfänglich kleinen Abweichung einer Trajektorie gegenüber einer anderen – je größer die Determinante in (3.9), desto kleiner die Stabilität der involvierten Trajektorie. In der Praxis wird die Monodromiematrix mithilfe der Differentialgleichung [55]

$$\frac{d}{dt}\mathbf{M} = -\mathbf{J}\mathbf{H}\mathbf{M} \quad (3.11)$$

bestimmt, mit

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}$$

und der Hesseschen Matrix

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{p}^T} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{p} \partial \mathbf{q}^T} \\ \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{p}^T} & \frac{\partial^2 H}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{q}^T} \end{pmatrix}.$$

Die Anfangsbedingung für die Monodromiematrix ergibt sich direkt aus ihrer Definition (3.10)

$$\mathbf{M}(0) = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Des Weiteren beinhaltet der HK-Propagator (3.8) kohärente Zustände in Ortsdarstellung der Form

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{z} \rangle = \left(\frac{\gamma}{\pi} \right)^{N/4} \exp \left(-\frac{\gamma}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{q})^2 + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}(\mathbf{r} - \mathbf{q}) \right). \quad (3.13)$$

Da die Breiten dieser gaußschen Wellenpakete konstant sind, spricht man im Zusammenhang mit dem HK-Propagator auch von der “Frozen Gaussian Approximation”. Die Zentren der finalen gaußschen Wellenpakete im Phasenraum sind Lösungen der klassischen hamiltonschen Bewegungsgleichungen und werden hier $\mathbf{p}_t(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)$ und $\mathbf{q}_t(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i)$ genannt.

Es kann gezeigt werden [61], dass der HK-Propagator dem VVG-Propagator äquivalent ist. Im Gegensatz zum letztgenannten liefert der HK-Propagator hingegen keine Singularitäten an den konjugierten Punkten. Allerdings ist es für die Numerik von Bedeutung, dass die Wurzel einer komplexen Größe im HK-Vorfaktor (3.9) eine kontinuierliche Funktion in Abhängigkeit der Zeit ist. Dies entspricht der Berücksichtigung des Maslovindex im VVG-Propagator, welcher im Rahmen des HK-Propagators nicht explizit berechnet werden muss.

Die Handhabung des HK-Propagators (3.8) ist im Allgemeinen kompliziert, da die Integration über den gesamten Phasenraum auszuführen ist. Andererseits bietet

sich die Propagation eines anfänglichen kohärenten Zustands $|\mathbf{z}_0\rangle$ an. Zu berechnen ist also

$$\langle \mathbf{r}_f | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{z}_0 \rangle = K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{z}_0, 0) = \int d^N r_i K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{r}_i, 0) \langle \mathbf{r}_i | \mathbf{z}_0 \rangle .$$

Wird für den Propagator der HK-Propagator (3.8) eingesetzt, so erhält man

$$K(\mathbf{r}_f, t; \mathbf{z}_0, 0) = \int \frac{d^N p_i d^N q_i}{(2\pi\hbar)^N} \langle \mathbf{r}_f | \mathbf{z}(t) \rangle R(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t) \exp \left(\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{p}_i, \mathbf{q}_i, t) \right) \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle . \quad (3.14)$$

Vorausgesetzt der Anfangszustand $|\mathbf{z}_0\rangle$ hat dieselben Breitenparameter γ wie die kohärenten Basiszustände, ergibt sich für den Überlapp $\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle$ der kohärenten Zustände

$$\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle = \exp \left(-\frac{\gamma}{4} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)(\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_0) - \frac{1}{4\gamma\hbar^2} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0)^2 \right) . \quad (3.15)$$

Es ist allerdings nicht notwendig, die Breiten der kohärenten Zustands-Basis als identisch mit der Breite des zu entwickelnden Zustands anzunehmen. Auch für verschiedene Breiten ist der Überlapp analytisch zu berechnen, und es ergibt sich ein etwas komplizierterer Ausdruck als (3.15), dessen Herleitung im Anhang A zu finden ist. Der Ausdruck (3.14) zeigt, dass zwar immer noch über den gesamten Phasenraum integriert werden muss. Da jedoch der Überlapp (3.15) alle Integranden exponentiell abschneidet, die zu weit vom Zentrum des anfänglichen kohärenten Zustandes entfernt sind, ist effektiv nicht mehr über den gesamten Phasenraum zu integrieren. In der Praxis und in der vorliegenden Arbeit wird der Ausdruck (3.14) mittels Monte-Carlo-Integration ausgewertet [63]. Dabei wird der Realteil des Überlapps $\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle$ mithilfe von sogenanntem “Importance-Sampling” [64] ausgewürfelt. Die einzelnen Trajektorien werden mit Runge-Kutta-Verfahren oder einfachen Leapfrog-Methoden in der Zeit entwickelt. Für jede Trajektorie wird der gesamte Ausdruck (3.14) berechnet, und am Ende werden die Beiträge aller Trajektorien aufsummiert.

In den Kapiteln 6 und 7 soll der HK-Propagator (3.8) angewendet werden, um die Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelminimum bzw. im Drei-Topf-System zu untersuchen. Da es aber das selbst gesteckte Fernziel ist, die Dynamik ultrakalter Bosonen in beliebigen Potentialen $V(\mathbf{r})$ theoretisch zu beschreiben, wird im Folgenden der Herman-Kluk-Propagator für ein beliebiges bosonisches Feld vorgestellt.

Dafür werden zunächst die bosonischen kohärenten Zustände eingeführt. Diese lassen sich analog zu (3.6) definieren, mit dem Unterschied, dass sie nun mithilfe eines komplexen Feldes $\psi(\mathbf{r})$ darzustellen sind

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = \exp\left(-\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} |\psi(\mathbf{r})|^2 + \int d\mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})\right) |0\rangle, \quad (3.16)$$

mit dem bereits bekannten bosonischen Feldoperator $\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r})$ aus Abschnitt 2.1. Diese kohärenten Zustände sind wieder Eigenzustände des (hier bosonischen) Vernichtungsoperators

$$\hat{\psi}(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})\rangle = \psi(\mathbf{r})|\psi(\mathbf{r})\rangle. \quad (3.17)$$

Somit lässt sich der Herman-Kluk-Propagator für ein allgemeines Feld von Bosonen mit dem Vielteilchenhamiltonoperator (3.1) darstellen als

$$\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\right)_{HK} = \int D[\psi_i, \psi_i^*] R[\psi, \psi^*, t] e^{\frac{i}{\hbar}S[\psi, \psi^*, t]} |\psi(\mathbf{r}, t)\rangle \langle \psi_i(\mathbf{r})| \quad (3.18)$$

Die Integration wird hier zu einem Funktionalintegral, und der Stabilitätsfaktor R und die Wirkung treten ebenfalls als Funktionale der komplexen Felder ψ auf. Das Wirkungsfunktional lässt sich nach [14] schreiben als

$$\begin{aligned} S[\psi, \psi^*, t] &= \int_0^t dt' L(\psi, \psi^*, t') = \int_0^t dt' \int d\mathbf{r} \left\{ \frac{i\hbar}{2} \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t'} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t'} \right) \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + V(\mathbf{r}) |\psi|^2 + \frac{g}{2} |\psi|^4 \right) \right\}. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Die Abhängigkeiten der komplexen Felder ψ und ψ^* von Ort und Zeit wurden hier der Übersicht zuliebe nicht ausgeschrieben. Die im Wirkungsfunktional auftauchenden Zeitableitungen der komplexen Felder sind der im Kapitel 2.2 hergeleiteten Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.10) zu entnehmen.

Der Herman-Kluk-Propagator für ein bosonisches Feld (3.18) ist offensichtlich schwer in voller Form auszuwerten, auch wenn die hier eingehende klassische Bewegungsgleichung, die Gross-Pitaevskii-Gleichung, im Prinzip numerisch zu lösen ist. Andererseits ist die Bestimmung von Observablen wie z.B. Einteilchendichten der Form $\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle$ mithilfe des HK-Propagators durchaus denkbar. Für wenige beteiligte Moden im Rahmen des bereits erwähnten Bose-Hubbard-Modells hingegen ist die Anwendung des HK-Propagators zur Ermittlung der vollen Wellenfunktion umzusetzen, was in den Kapiteln 6 und 7 diskutiert wird.

3.3 Truncated Wigner Approximation

Im vorangegangenen Kapitel 2.3 wurde ausgeführt, wie die theoretische Beschreibung der Dynamik ultrakalter Bosonen auf Basis der Wigner-Darstellung gelingt. Allerdings stellte sich heraus, dass die Zeitentwicklung der Wignerverteilung (2.15) unhandlich und schwer zu lösen ist. Einfacher wird das Problem hingegen, wenn man in der zweiten Zeile von (2.15) die Terme vernachlässigen kann, die Ableitungen dritter Ordnung enthalten. Diese Näherung wird “Truncated Wigner Approximation” (TWA) genannt, und es konnte gezeigt werden, dass sie für einige Anwendungen immer dann zu guten Ergebnissen führt, wenn keine wahren Quanteneffekte auftreten [65, 66, 67]: Es ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\partial W[\psi, \psi^*]}{\partial t} = & \int d\mathbf{r} \left[\frac{i}{\hbar} \frac{\delta}{\delta \psi(\mathbf{r})} \left(\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right. \right. \\ & \left. \left. + g(|\psi(\mathbf{r})|^2 - \delta(\mathbf{r}, \mathbf{r})) \right) \psi(\mathbf{r}) + \text{h.c.} \right] W[\psi, \psi^*] . \end{aligned} \quad (3.20)$$

Diese resultierende Gleichung für die Zeitentwicklung der Wignerfunktion ist offensichtlich eine Differentialgleichung, die die Zeitentwicklung einer Trajektorie einer einzelnen Realisierung des Feldes $\psi(\mathbf{r})$ beschreibt. Sie nimmt die Form einer klassischen Liouvillegleichung an, deren zugrunde liegenden hamiltonschen Bewegungsgleichungen der Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.9) entsprechen. Der $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r})$ -Term in Ausdruck (3.20) lässt sich durch eine Neudefinition der globalen Phase von ψ eliminieren ohne Konsequenzen für die daraus folgende Physik [41]. Im Unterschied zur Gross-Pitaevskii-Theorie umfasst die Beschreibung allerdings nicht nur eine einzelne Realisierung eines klassischen Feldes, sondern eine Verteilung – nämlich die Wignerverteilung – klassischer Trajektorien. Diese muss in der Praxis entsprechend der anfänglichen Wignerfunktion gesampelt werden.

Das Abschneiden der Ableitungen dritter Ordnung hat offensichtlich den Effekt, dass Zustände nicht korrekt dargestellt werden können, deren Wignerfunktion negative Werte annimmt (für eine nicht-negative Anfangswignerverteilung). Folglich beinhaltet die TWA keine typischen Quanteneigenschaften wie z.B. die Kohärenzen der Trajektorien untereinander.

Die TWA ist hingegen exakt im bereits erwähnten klassischen Grenzfall, in dem die Teilchenzahl gegen unendlich geht, das Produkt aus Teilchenzahl und Wechselwirkungsstärke jedoch konstant gehalten wird [42]

$$N \rightarrow \infty , \quad g \rightarrow 0 , \quad gN = \text{konst} , \quad (3.21)$$

vorausgesetzt die Wignerverteilung ist hinreichend glatt. Dies ist leicht zu sehen, wenn man das komplexe Feld wie in (3.1) entsprechend $\Phi := \frac{1}{\sqrt{N}}\psi$ renormiert. In die exakte Zeitentwicklung der Wignerfunktion (2.15) eingesetzt, ergibt sich

vor den Ableitungen dritter Ordnung die Konstante g/N , welche im klassischen Grenzfall gegen null geht. Somit bleibt nur der erste Term übrig, und der Ausdruck (3.20) ist folglich asymptotisch die exakte Bewegungsgleichung des Systems. Ist die Wignerverteilung hingegen nicht hinreichend glatt, können Ableitungen dritter Ordnung in der Größenordnung von N/g beitragen, so dass das Abschneiden ernsthafte Fehler verursacht. Diese Einschränkung kennzeichnet offensichtlich einen bedeutenden Unterschied zwischen TWA und den semiklassischen Propagatoren, für deren Herleitung nur die Annahme eingeht, dass die beteiligten Wirkungen groß im Vergleich zu \hbar/N sind.

Wie bereits ausgeführt stecken die Quanteneigenschaften im Rahmen der TWA in der Anfangsverteilung, so dass sie zu den semiklassischen Näherungen zählt. Eine rein deterministische klassische Beschreibung erhält man nur für den Fall, dass der Anfangszustand durch eine Deltafunktion im Phasenraum darzustellen ist und somit nur eine einzelne Trajektorie eingeht. Dies ist genau der Grenzfall eines Bose-Einstein-Kondensats bei $T = 0$ im klassischen Limes, in dem die Gross-Pitaevskii-Gleichung für verschwindende Quantenfluktuationen exakt ist. Dass die Bedingungen für die Gültigkeit der TWA ein aktuelles Forschungsthema darstellen, ist ausführlich in [42, 41] nachzulesen. In den Kapiteln 6 und 7 soll diskutiert werden, unter welchen Umständen die Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential bzw. im Drei-Topf-Potential mithilfe der TWA zu beschreiben ist.

4 Ultrakalte Bosonen im Doppelmuldenpotential

Als zentrales Modellsystem soll hier das bosonische Doppelmuldensystem vorgestellt werden, das auch als bosonischer Josephson-Kontakt bekannt ist [68]. Es wird sich als ein äußerst interessantes Modellsystem herausstellen, unter anderem im Zusammenhang mit der Untersuchung von Relaxation in wechselwirkenden geschlossenen Quantensystemen. Der Begriff “Josephson-Kontakt” stammt aus der Supraleiterphysik und geht auf Brian D. Josephson zurück, der 1962 den nach ihm benannten Josephson-Effekt theoretisch vorhersagte [69]. Dieses System besteht aus zwei Supraleitern, die über eine dünne nichtleitende Schicht gekoppelt sind. Entgegen den klassischen Erwartungen fließt durch diesen Kontakt ein Strom, vorausgesetzt die Dicke des Isolators ist klein genug gewählt. In der Folge können die Wellenfunktionen der Leiterelektronen überlappen, was zum Tunneln der Elektronen durch die nichtleitende Schicht führt. Nach der ersten experimentellen Realisierung 1963 [70] wurde der Josephson-Effekt in verschiedensten Konfigurationen Grundlage vielfältiger Anwendungen [71, 72].

Da die Tunneldynamik auf der Existenz zweier schwach gekoppelter makroskopischer Quantenzustände basiert, ließ sich ein ähnliches dynamisches Verhalten in Systemen mit suprafluidem Helium beobachten, zuerst 1997 mit ^3He [73, 74, 75] und später mit ^4He [76]. Die Forscher standen vor der Herausforderung, eine nur schwache Kopplung in solchen neutralen Quantenflüssigkeiten zu erzeugen.

Bereits 1986, also fast 10 Jahre vor den ersten experimentellen Realisierungen von Bose-Einstein-Kondensaten, erkannte Javanainen [77] den Zusammenhang zwischen dem Josephson-Effekt bei Supraleitern und ultrakalten Bosonen im Doppelmuldenpotential, und regte entsprechende Experimente an. Nachdem 1995 die ersten Kondensate erzeugt werden konnten [10, 7, 11], war der Weg bereitet für die qualitative und quantitative Erforschung des Josephson-Effekts in einer gut kontrollierbaren Umgebung. Eine Anordnung mehrerer tunnelnder Bose-Einstein-Kondensate wurde erstmalig 1998 erzeugt [78]. Die Kondensate waren dabei in vertikal orientierten periodischen Potentialen platziert, aus denen einzelne Atome mithilfe des Einflusses der Gravitation auszukoppeln waren. 2001 wurde dann der Josephson-Effekt zum ersten Mal in einer Kette aus bosonischen Josephson-Kontakten beobachtet [79]. Im Folgenden soll der Fokus allerdings auf einem ein-

zelenen Josephson-Kontakt liegen, dessen erste experimentelle Realisierung 2005 gelang [4]. Dieses Experiment der Heidelberger Gruppe um Professor Oberthaler wird in Abschnitt 4.1 detaillierter beschrieben. In der Reihe erfolgreicher Experimente zu bosonischen Josephson-Kontakten ist weiter die Gruppe um Professor Schmiedmayer zu nennen, die im gleichen Jahr mithilfe sogenannter Radiofrequenz-“dressed-states” ein Doppelmuldenpotential für ^{87}Rb -Atome auf einem Atomchip erzeugte [80, 81]. Dabei wurden zwei Hyperfeinniveaus der Atome durch das eingestrahlte magnetische Radiofrequenz-Feld gekoppelt, analog zu optischen Dipolfallen, in denen elektronischer Grund- und angeregter Zustand gekoppelt werden. 2007 gelang es schließlich, sowohl den AC als auch den DC Josephson-Effekt in einem Bose-Einstein-Kondensat zu beobachten [82].

Aber auch aus anderen Blickwinkeln ist das Doppelmuldenproblem von großem Interesse. Es weist z.B. eine klassische Bifurkation im Phasenraum auf [30], worauf in Abschnitt 4.3.2 noch näher eingegangen werden soll. Weiterhin konnten mit Hilfe solch eines Systems die Kohärenzeigenschaften von Bose-Einstein-Kondensaten eindrucksvoll demonstriert werden [19, 20], indem die Überlagerung zweier Bose-Einstein-Kondensate zu einem Interferenz-Muster führte.

Auf die Vorstellung des Heidelberger Doppelmuldenexperiments in Abschnitt 4.1 folgt die theoretische Beschreibung solcher Systeme: So wird in Kapitel 4.2.1 die Zwei-Moden-Näherung vorgestellt, die in 4.2.2 im Rahmen der klassischen Gross-Pitaevskii-Beschreibung weiter vereinfacht wird. In Abschnitt 4.3 werden die dynamischen Besonderheiten des Doppelmuldenystems diskutiert, und im Zuge dessen die beiden theoretischen Beschreibungen einander gegenüber gestellt.

4.1 Experimentelle Realisierung

Im Folgenden wird das Doppelmulden-Experiment der Heidelberger Gruppe um Professor Oberthaler vorgestellt, die ein ^{87}Rb -Bose-Einstein-Kondensat in einer optischen Dipolfalle erzeugte [4]: In diesem Experiment wird eine hinreichend vorgekühlte thermische Wolke in die optische Dipolfalle geladen, welche aus zwei gekreuzten Laserstrahlen aufgebaut ist. Durch erzwungenes evaporatives Kühlen, bei dem die Laserintensitäten langsam heruntergefahren werden, um immer wieder die heißesten Atome aus der Falle zu entfernen, wird das Gas auf Temperaturen unterhalb der kritischen Temperatur zur Bose-Einstein-Kondensation gekühlt. Die niedrigsten zu erreichenden Temperaturen sind von der Größenordnung 10nK [68]. Schließlich befindet sich ein Bose-Einstein-Kondensat bestehend aus ungefähr 1150 ± 150 Atomen in der optischen Dipolfalle, deren Potential für kleine Energien nahezu harmonisch ist [83]. Dessen Frequenzen betragen ungefähr $\omega_x = 2\pi \times 78 \text{ Hz}$, $\omega_y = 2\pi \times 66 \text{ Hz}$ und $\omega_z = 2\pi \times 90 \text{ Hz}$, wobei die Gravitation in die y -Richtung wirkt. Dieses harmonische Potential wird dann im weiteren Verlauf durch eine Su-

perposition aus einer stehenden Welle und einem Doppelmuldenpotential. Dazu werden zwei gegenläufige Laserstrahlen mit einer Wellenlänge von 811nm, die sich in einem Winkel von ca. 10° kreuzen (siehe Abbildung 4.1a)), miteinander überlagert, so dass ein periodisches optisches Potential mit einer Periode von ungefähr $5.2\mu\text{m}$ entsteht. Die Amplitude der stehenden Welle wird adiabatisch bis zu einem Wert von $V_0 = 2\pi\hbar \times (412 \pm 20)\text{Hz}$ erhöht. Dadurch führt die Überlagerung mit der Dipolfalle zu einem Doppelmuldenpotential in x -Richtung, siehe Abbildungen 4.1b) und 4.1c). Das Doppelmuldenpotential in x -Richtung ist dann von der Form

$$V(x) = \frac{1}{2}m(\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) + \frac{V_0}{2} \left(1 + \cos \frac{2\pi}{d_{\text{sw}}} x \right). \quad (4.1)$$

Dabei steht m für die Masse der Atome in der Falle, d_{sw} für die Periodizität und V_0 für die Höhe des periodischen Potentials, das als Barriere in x -Richtung wirkt. Das harmonische Fallenpotential ist durch die drei Fallenfrequenzen ω_x , ω_y und ω_z charakterisiert. Die Barrierenhöhe V_0 hängt letztendlich von der Intensität des optischen Gitters ab und ist somit einfach zu kontrollieren.

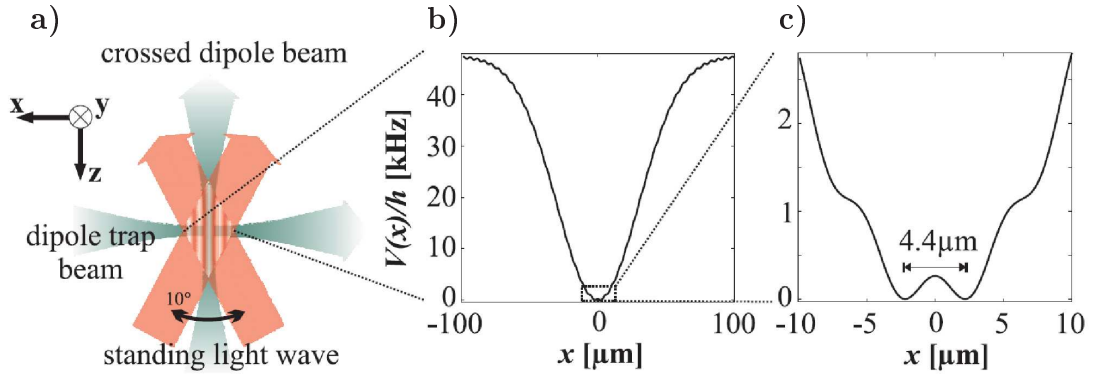


Abbildung 4.1: Experimentelle Realisierung des Doppelmuldenpotentials als Überlagerung einer harmonischen optischen Falle und eines optischen Gitters, welches als Barriere fungiert (aus [68]):

a) Schema der Laser, die die optischen Potentiale erzeugen. Die zwei zueinander senkrechten Laser der Wellenlänge 1064nm bewirken den harmonischen Einschluss der Atome in 3D, wohingegen die zwei sich unter einem Winkel von ca. 10° kreuzenden Laserstrahlen der Wellenlänge 830nm das optische Gitter mit einer Periodizität von ungefähr $5\mu\text{m}$ hervorrufen.

b) Das resultierende Potential auf der Skala der optischen Dipolfalle.

c) Ausschnitt des resultierenden Potentials im Zentrum der Falle, welcher die Doppelmuldenstruktur am Minimum des Potentials zeigt.

Um mit diesem experimentellen Aufbau Josephson-Dynamik beobachten zu können, muss anfangs eine Populationsdifferenz des Kondensates zwischen den beiden Potentialtöpfen herrschen, weil sich anderenfalls die Populationen zeitlich nicht ändern würden. Die notwendige Differenz in den Populationen wird durch Kippen des harmonischen Potentials in x -Richtung gegenüber dem periodischen Potential erreicht. Dieser “Quench“ führt zu einem zusätzlichen linearen Term in (4.1), der eine Asymmetrie des Potentials bewirkt.

In der Praxis wird das gekippte System in den Grundzustand gebracht. Anschließend wird die Asymmetrie des Potentials auf der Zeitskala der Tunneldynamik schnell aufgehoben, so dass sich die Atome nicht länger in einem Eigenzustand befinden und anfangen, sich im Potential zu bewegen. Die resultierende Dynamik wird durch ein interessantes Wechselspiel aus Tunneln und Wechselwirkung charakterisiert, welches in Abschnitt 4.3 diskutiert wird. Gemessen werden im Experiment die Populations- und Phasendifferenz, die zwischen den beiden Potentialtöpfen auftreten, in Abhängigkeit der Zeit. Die Populationen werden direkt aus den Intensitätsverteilungen bestimmt, die mit Hilfe einer CCD-Kamera aufgenommen werden. Die Phasendifferenz kann hingegen nicht direkt gemessen werden, sondern wird aus Interferenzbildern gewonnen. Die Teilchendichte im Doppelmuldenpotential ist näherungsweise als Summe zweier getrennter Wellenpakete zu sehen, die sich bei Abschalten der Falle ausdehnen und miteinander ein Interferenzmuster bilden, aus dem dann die Phasendifferenz je nach Lage der Maxima abzulesen ist.

4.2 Theoretische Beschreibung ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential

4.2.1 Zwei-Moden-Näherung

Zur theoretischen Behandlung des in Abschnitt 4.1 vorgestellten Experiments soll hier die Zwei-Moden-Näherung vorgestellt werden. Im Allgemeinen ist die theoretische Beschreibung solcher Vielteilchenprobleme nicht einfach. Die dem Hamiltonoperator (2.1) entsprechende Vielteilchen-Schrödingergleichung ist aufgrund des nichtlinearen Terms, der der Wechselwirkung der Atome untereinander zuzuschreiben ist, nicht exakt lösbar und nur für sehr geringe Teilchenzahlen numerisch exakt zu behandeln [84]. Allerdings kann im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung die Dimension des Hilbertraums gravierend verringert werden, was der speziellen Struktur des Energiespektrums des Doppelmuldenproblems geschuldet ist. Die schwache Kopplung, die den Josephson-Kontakt ermöglicht, führt zu einer kleinen Aufspaltung in der Energie zwischen Grund- und erstem angeregtem Zustand

des Doppelmuldenpotentials [68], wohingegen der Abstand zu den höher gelegenen Zuständen deutlich größer ist. Dies ist schematisch in Abbildung 4.2 dargestellt.

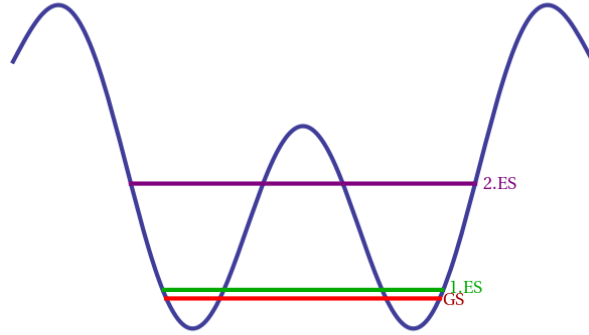


Abbildung 4.2: Schematische Darstellung des Energiespektrums im Doppelmuldenpotential (blau). Der Grundzustand (GS) und der erste angeregte Zustand (1.ES) liegen nahe beieinander im Vergleich zum nächsthöheren zweiten angeregten Zustand (2.ES).

Für niedrige Temperaturen und kleine energetische Anregungen sind daher lediglich die beiden niedrigsten Energiezustände relevant, und der Einfluss der höher gelegenen, nur schwach besetzten Moden ist vernachlässigbar. Damit reduziert sich die Dimension des Hilbertraums auf $N + 1$ Fockzustände, wobei N die Anzahl der Atome im Potential ist. Dies wird ersichtlich beim Betrachten der Fock-Anzahl-Zustände $|n_1, n_2\rangle$: Es gibt $N + 1$ Möglichkeiten, die ununterscheidbaren Teilchen auf die zwei Moden zu verteilen. Da zur theoretischen Behandlung höherer energetischer Anregungen die Zwei-Moden-Näherung jedoch nicht hinreichend ist, müssen “Multi-Moden-Theorien” zur Anwendung kommen, wie sie z.B. in [85], [86] und [87] diskutiert werden. Die vorliegende Arbeit wird sich allerdings ausschließlich mit der Zwei-Moden-Näherung beschäftigen.

Diese wurde in [88] zur theoretischen Beschreibung der Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential eingeführt und seitdem in zahlreichen wissenschaftlichen Veröffentlichungen diskutiert [89, 90, 91, 92, 93]. Hier wird die Zwei-Moden-Näherung in Anlehnung an [68] vorgestellt. Der Vielteilchen-Hamiltonoperator in zweiter Quantisierung (2.3) bildet den Ausgangspunkt. Wie bereits in Kapitel 2.1 diskutiert, kann dieser für ultrakalte bosonische Gase mithilfe der Streutheorie

durch Einsetzen eines Kontaktpotentials stark vereinfacht werden. Für den Hamiltonoperator ergibt sich somit

$$\hat{H} = \int [-\hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \hat{\psi}(\mathbf{r}) + V_{\text{dw}}(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r})] d\mathbf{r} + \frac{g}{2} \int \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} . \quad (4.2)$$

In dem Ausdruck steht g wieder für die Kopplungskonstante (2.6) und V_{dw} für das Doppelmuldenpotential. Da aufgrund der tiefen Temperaturen nur die zwei energetisch niedrigsten Moden berücksichtigt werden, und zwar der Grundzustand $\Phi_g(\mathbf{r})$ und der erste angeregte Zustand $\Phi_e(\mathbf{r})$, kann der Feldoperator anhand von (2.8) folgendermaßen entwickelt werden

$$\hat{\psi}(\mathbf{r}) = \hat{c}_g \Phi_g(\mathbf{r}) + \hat{c}_e \Phi_e(\mathbf{r}) , \quad (4.3)$$

wobei die Einteilchen-Wellenfunktionen $\Phi_{g,e}$ Lösungen der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.10) darstellen und auf eins normiert sind: $\int d\mathbf{r} |\Phi_{g,e}(\mathbf{r})|^2 = 1$. Zudem bezeichnen \hat{c}_g und \hat{c}_e die Vernichterooperatoren für ein Teilchen im Grund- bzw. angeregten Zustand. Zusammen mit den dazugehörigen Erzeugungsoperatoren \hat{c}_g^\dagger und \hat{c}_e^\dagger erfüllen sie die in Abschnitt 2.1 aufgeführten gewöhnlichen bosonischen Vertauschungsrelationen. Da der Grundzustand symmetrisch und der angeregte Zustand antisymmetrisch ist (siehe Abbildung 4.3), bietet es sich an, einen Basiswechsel zu den Zuständen $\Phi_l = \Phi_g + \Phi_e$ und $\Phi_r = \Phi_g - \Phi_e$ durchzuführen, deren Normen gerade der Anzahl der Teilchen im linken bzw. rechten Potentialtopf entsprechen. Die Bezeichnungen “links” und “rechts” sind in diesem System natürlich willkürlich gewählt. Sie sollen lediglich zum Ausdruck bringen, dass die entsprechenden Wellenfunktionen auf unterschiedlichen Seiten des Potentials lokalisiert sind. Die Vernichtungsoperatoren der Anzahl-Zustände sind dann

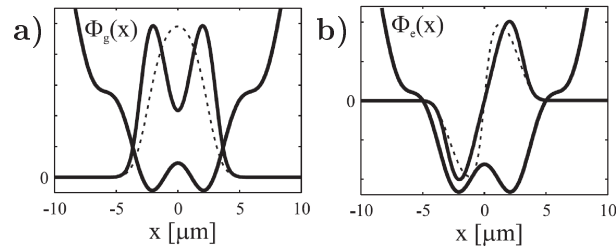


Abbildung 4.3: Die durchgezogene Linie stellt a) den Grundzustand und b) den ersten angeregten Zustand im Doppelmuldenpotential dar, berechnet durch das Lösen der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.10) für $N = 1150$ Atome (aus [21]). Die gestrichelte Linie zeigt jeweils die Wellenfunktionen im harmonischen Potential ohne das überlagerte optische Gitter.

$\hat{c}_l = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_g + \hat{c}_e)$ und $\hat{c}_r = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_g - \hat{c}_e)$, und in dieser Basis schreibt sich der Feldoperator

$$\hat{\psi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{c}_l\Phi_l + \hat{c}_r\Phi_r) . \quad (4.4)$$

Setzt man diesen Feldoperator in den Hamiltonoperator (4.2) ein, so findet sich nach einigen Rechnungen [68, 92] der Zwei-Moden-Hamiltonian

$$\hat{H}_{2M} = U(\hat{c}_r^\dagger\hat{c}_r^\dagger\hat{c}_r\hat{c}_r + \hat{c}_l^\dagger\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_l\hat{c}_l) - T(\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_r + \hat{c}_r^\dagger\hat{c}_l) + \frac{\delta E}{4}(\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_r + \hat{c}_r^\dagger\hat{c}_l)^2 , \quad (4.5)$$

mit den Parametern

$$\begin{aligned} U &= \kappa_{ge} \\ T &= \frac{1}{2}(\mu_e - \mu_g) - \frac{(N-1)}{2}(\kappa_{ee} - \kappa_{gg}) \\ \delta E &= \frac{\kappa_{gg} + \kappa_{ee} - 2\kappa_{ge}}{4} \\ \kappa_{ij} &= \frac{g}{2} \int d\mathbf{r} |\Phi_i|^2 |\Phi_j|^2 , \quad \text{wobei } i, j = g, e \\ \mu_{g/e} &= \int d\mathbf{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Phi_{g/e} \nabla^2 \Phi_{g/e} + \Phi_{g/e} (V_{dw} + gN|\Phi_{g/e}|^2) \Phi_{g/e} \right) . \end{aligned}$$

Der erste Term im Zwei-Moden-Hamiltonoperator (4.5) beschreibt die lokale Wechselwirkung der Atome in den Potentialtöpfen und ist offensichtlich mit der s-Wellen-Streulänge verknüpft. Diese lässt sich mit Hilfe von sogenannten Feshbachresonanzen verändern [14, 94], wodurch der Parameter U im Experiment zu kontrollieren ist [30, 4]. Der zweite Term beschreibt das Tunneln der Atome durch die Potentialbarriere und ist ebenfalls im Experiment veränderlich, da er mit der Barrierenhöhe V_0 des Potentials zusammenhängt, die wiederum mit der Intensität des optischen Gitters verknüpft ist. Der dritte nichtlineare Tunnelterm berücksichtigt zusätzlich Zwei-Teilchen-Prozesse. Da dieser im diskutierten Experiment um Größenordnungen kleiner ist als die beiden ersten Terme, wird er im Folgenden vernachlässigt (siehe zur Diskussion des nichtlinearen Tunnelterms und dessen Auswirkungen [92]). Man findet schließlich den wohlbekannten Bose-Hubbard-Hamiltonian (2.8) für zwei Potentialtöpfe

$$\hat{H}_{BH,2} = U(\hat{c}_r^\dagger\hat{c}_r^\dagger\hat{c}_r\hat{c}_r + \hat{c}_l^\dagger\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_l\hat{c}_l) - T(\hat{c}_l^\dagger\hat{c}_r + \hat{c}_r^\dagger\hat{c}_l) , \quad (4.6)$$

der bereits in Abschnitt 2.1 für eine große Anzahl von Potentialtöpfen eingeführt wurde. Zu ergänzen ist, dass zum Bose-Hubbard-Hamiltonian (4.6) für das gekippte System ein weiterer Term $+\delta(\hat{n}_l - \hat{n}_r)$ hinzukommt mit δ als der Stärke der Verkipfung.

Wie bereits ausgeführt reduziert sich die Dimension des Hilbertraums im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung auf $N + 1$, da die Wellenfunktion der N Atome eine beliebige Superposition der $N + 1$ Fock-Zustände

$$|n_l, n_r\rangle = \frac{(\hat{c}_l^\dagger)^{n_l}}{\sqrt{n_l!}} \frac{(\hat{c}_r^\dagger)^{n_r}}{\sqrt{n_r!}} |0, 0\rangle$$

sein kann, wobei n_l bzw. n_r gerade für die Anzahl der Atome im linken bzw. rechten Potentialtopf stehen. Diese hängen natürlich über die Gesamtteilchenzahl zusammen: $n_l = N - n_r$. Deshalb wird der Übersichtlichkeit halber im Folgenden statt n_l nur noch n geschrieben, und n_r wird zu $N - n$. Die Gesamtwellenfunktion schreibt sich also als

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n, N - n\rangle \quad \text{oder kürzer} \quad |\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle. \quad (4.7)$$

Bevor in Abschnitt 4.3 die Josephson-Dynamik diskutiert wird, soll in Abschnitt 4.2.2 die klassische Approximation der Zwei-Moden-Näherung vorgestellt werden. In dieser werden die Operatoren genau wie im Rahmen des Gross-Pitaevskii-Ansatzes aus 2.2 durch komplexe Zahlen ersetzt, da davon auszugehen ist, dass bei großen Besetzungszahlen die Effekte der zweiten Quantisierung keine entscheidende Rolle spielen.

4.2.2 Klassische Beschreibung

Wie bereits in Abschnitt 2.2 diskutiert, können im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Beschreibung die Operatoren durch komplexe Zahlen ersetzt werden, wenn die dazugehörigen Moden hoch besetzt sind. Da bei ultrakalten Bosonen im Doppelmuldenpotential nur die beiden niedrigsten Moden eine Rolle spielen (siehe Abschnitt 4.2.1), erfolgt für die Wellenfunktion der Zwei-Moden-Ansatz [88, 95, 96, 97]

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi_g(t) \Phi_g(\mathbf{r}) + \psi_e(t) \Phi_e(\mathbf{r}). \quad (4.8)$$

Hier sind die Funktionen $\Phi_{g/e}$ wieder Lösungen der stationären Gross-Pitaevskii-Gleichung (2.10). Einsetzen des Ansatzes (4.8) in die zeitabhängige GPE (2.9) und Vernachlässigen von Überlapptermen vierter Ordnung der Zustände $\Phi_{g/e}$ führt zu zwei gekoppelten Differentialgleichungen der Amplituden $\psi_{g/e}$ mit der Zeit. Nach der Vorarbeit im vorangegangenen Abschnitt gelangt man allerdings zu den glei-

chen Resultaten, wenn man die Operatoren im Bose-Hubbard-Hamiltonian (4.6) mit komplexen Amplituden ersetzt

$$\begin{aligned}\hat{c}_{l/r} &\Rightarrow \sqrt{n_{l/r}(t) + \frac{1}{2}} e^{i\varphi_{l/r}(t)} \\ \hat{c}_{l/r}^\dagger &\Rightarrow \sqrt{n_{l/r}(t) + \frac{1}{2}} e^{-i\varphi_{l/r}(t)} .\end{aligned}$$

Man erhält eine klassische Hamiltonfunktion in Abhängigkeit der Teilchenzahlen im linken bzw. rechten Potentialtopf $n_{l/r}$ und der dazu kanonisch konjugierten Phasen $\varphi_{l/r}$. Da die Summe der Teilchenzahlen N erhalten ist, und die Hamiltonfunktion nur von der Differenz der Phasen $\varphi_l - \varphi_r$ abhängt, bietet sich eine kanonische Transformation in den Variablen

$$n_l, n_r, \varphi_l, \varphi_r \rightarrow N = n_l + n_r, j = \frac{n_l - n_r}{2}, \varphi = \varphi_l - \varphi_r, \Phi = \frac{\varphi_l + \varphi_r}{2}$$

an. Dieser Schritt führt zu einer klassischen Hamiltonfunktion in Abhängigkeit der Phasendifferenz φ und der Populationsdifferenz j

$$H(\varphi, j) = \frac{1}{2}UN^2 - UN + 2Uj^2 - 2T\sqrt{\left(\frac{(N+1)}{2}\right)^2 - j^2} \cos \varphi . \quad (4.9)$$

Dabei spielen φ und j die Rolle von kanonisch konjugiertem Ort und Impuls, so dass für die Bewegungsgleichungen gilt

$$\begin{aligned}\dot{\varphi} &= \frac{\partial H}{\partial j} = 4Uj + \frac{2Tj}{\sqrt{\left(\frac{(N+1)}{2}\right)^2 - j^2}} \cos \varphi \\ \dot{j} &= -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = -2T\sqrt{\left(\frac{(N+1)}{2}\right)^2 - j^2} \sin \varphi .\end{aligned} \quad (4.10)$$

Die Bewegungsgleichungen sind äquivalent zu den Bewegungsgleichungen eines Pendels, dessen Länge vom Impuls abhängt [98], wobei hier der Phasenraum allerdings in j endlich ($-N/2 \leq j \leq N/2$) und in φ periodisch ($-\pi \leq \varphi \leq \pi$) ist.

Abschnitt 4.3.2 behandelt die Dynamik des Bose-Einstein-Kondensats im Rahmen der hergeleiteten rein klassischen Bewegungsgleichungen (4.10), nachdem im folgenden Abschnitt die volle quantenmechanische Dynamik im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung diskutiert worden ist.

4.3 Dynamik im Doppelmuldenpotential

Der bosonische Josephson-Kontakt ist aus dynamischer Sicht ein überaus interessantes System. Das Kippen des Potentials realisiert die anfängliche Auslenkung der Bosonen (siehe Abschnitt 4.1). Durch diesen “Quench” geraten die Atome in Bewegung und können, je nach Barrierenhöhe des Potentials, zwischen den Mulden hin und her tunneln. Zudem ist die Wechselwirkung zu beachten: Durch die wechselseitigen Zusammenstöße sollte das Gas relaxieren und in einen (vorübergehend) stationären Zustand übergehen, soweit reduzierte Größen wie z.B. die Anzahl der Teilchen in den einzelnen Mulden betrachtet werden. Da das System als ein geschlossenes endliches Quantensystem aufgefasst wird, kann ein solcher stationärer Zustand natürlich nicht endgültig sein. Solange die Freiheitsgrade des Systems nicht gegen unendlich gehen, ist mit sogenannten Revivals zu rechnen.

4.3.1 Dynamik im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung

Nach 4.2.1 kann die Wellenfunktion in der Zwei-Moden-Näherung in Fock-Anzahl-Zuständen entwickelt werden

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^N c_n |n\rangle .$$

Zur numerischen Bestimmung der Dynamik wird der Bose-Hubbard-Hamiltonoperator (4.6) aus Abschnitt 4.2.1 in der Fock-Basis diagonalisiert. Wie allgemein bekannt ergibt sich dann für die Zeitentwicklung der Wellenfunktion

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^N b_n e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle . \quad (4.11)$$

Dabei sind E_n die $N + 1$ Eigenenergien mit den dazugehörigen Eigenzuständen $|\phi_n\rangle$. Die b_n bezeichnen die Koeffizienten der Entwicklung der Wellenfunktion in den Eigenmoden $b_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle$ mit dem Anfangszustand $|\psi_0\rangle$. Für die weiteren Simulationen und Rechnungen wurde \hbar gleich eins gesetzt. Die im Experiment gemessenen Observablen sind die Teilchenzahlen in den beiden Potentialtöpfen, die den Erwartungswerten der Anzahloperatoren $\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \rangle$ und $\langle \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_r \rangle$ entsprechen. Andererseits ist es sinnvoll, die Populationsdifferenz $j = \frac{1}{2}(\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l \rangle - \langle \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_r \rangle)$ zu betrachten (wie bereits in Abschnitt 4.2.2), da sie aufgrund der festen Gesamtteilchenzahl N einen Zusammenhang zwischen N_l und N_r herstellt. Für die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz ergibt sich dann aus (4.11)

$$j(t) = \frac{1}{2} \langle \psi(t) | \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_l - \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_r | \psi(t) \rangle = \sum_{n,m} A_{nm} e^{-i(E_n - E_m)t} , \quad (4.12)$$

wobei die Matrix A_{nm} gegeben ist durch

$$A_{nm} = b_n b_m^* \langle \phi_m | \hat{j} | \phi_n \rangle = \frac{1}{2} b_n b_m^* \sum_{l=0}^N (2l - N) \langle \phi_m | l \rangle \langle l | \phi_n \rangle \quad (4.13)$$

mit dem Operator $\hat{j} = (\hat{n}_1 - \hat{n}_2)/2$. Die resultierende Dynamik der Populationsdifferenz bzw. der Populationen in den Mulden lässt sich in Abhängigkeit der Systemparameter N , U und T in drei Regime unterteilen [99, 100]: das Rabi-, Josephson- und Fock-Regime.

Da der Parameter Λ das dynamische Regime des Systems festlegt, ist es sinnvoll, ihn mit $\Lambda = \frac{UN}{T}$ zu definieren. Die physikalischen Eigenschaften der Regime gehen aus den in Abhängigkeit von Λ unterschiedlichen Energiespektren und Eigenschaften des Grundzustandes hervor, was noch näher zu erläutern sein wird.

Eine weitere entscheidende Größe zur Charakterisierung der dynamischen Regime ist die Kohärenz $\mathcal{C}^{(1)}$ dieses Vielteilchenproblems [68]. Sie kann quantitativ durch die räumliche Korrelationsfunktion $g^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ erster Ordnung dargestellt werden [89]

$$g^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{|\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle|}{\sqrt{\langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\psi}(\mathbf{r}) \rangle \langle \hat{\psi}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\psi}(\mathbf{r}') \rangle}} .$$

Für symmetrische Zustände der Form (4.7) wird aus dem in \mathbf{r} und \mathbf{r}' kontinuierlichen $g^{(1)}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ein diskreter Ausdruck mit dem Index “links” und “rechts” [89]

$$\mathcal{C}^{(1)} = \frac{\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_r + \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_l \rangle}{N} . \quad (4.14)$$

Dieser Kohärenzfaktor erster Ordnung $\mathcal{C}^{(1)}$ ist also dem Erwartungswert des Tunneloperators im Bose-Hubbard-Hamiltonian (4.6) äquivalent und steht in direktem Zusammenhang mit der relativen Populationsdifferenz zwischen Grund- und erstem angeregtem Zustand. Dies ist leicht unter der Beachtung der Definitionen von \hat{c}_l und \hat{c}_r zu sehen: Mit diesen ergibt sich nämlich

$$\langle \hat{c}_l^\dagger \hat{c}_r + \hat{c}_r^\dagger \hat{c}_l \rangle = \langle \hat{c}_g^\dagger \hat{c}_g - \hat{c}_e^\dagger \hat{c}_e \rangle .$$

Rabi-Regime

Für festes N und sehr kleine Wechselwirkungen bzw. relativ große Tunnelraten (also kleine Barrierenhöhen des Potentials) nimmt Λ einen kleinen Wert an. Ist Λ deutlich kleiner als eins, befindet sich das System im Rabi-Regime, dem wechselwirkungsfreien Grenzfall, in dem die Atome mehr oder weniger unabhängig voneinan-

der durch die Barriere tunneln. Dieses Verhalten zeigt sich im Energiespektrum in Abbildung 4.4. Es entspricht näherungsweise dem linearen Spektrum eines harmonischen Oszillators. Die Dynamik besteht nahezu ausschließlich aus harmonischen sogenannten Plasmaoszillationen um $j = 0$, also um die Stelle, an der sich in den Mulden jeweils die gleiche Anzahl Atome befindet. Solch eine Dynamik zeigt Abbildung 4.5, in der die Zeit durch Multiplizieren mit der sogenannten Plasmafrequenz ω_p einheitenlos gemacht wurde. Die Plasmafrequenz wird in Abschnitt 4.3.2 mithilfe der klassischen Dynamik hergeleitet.

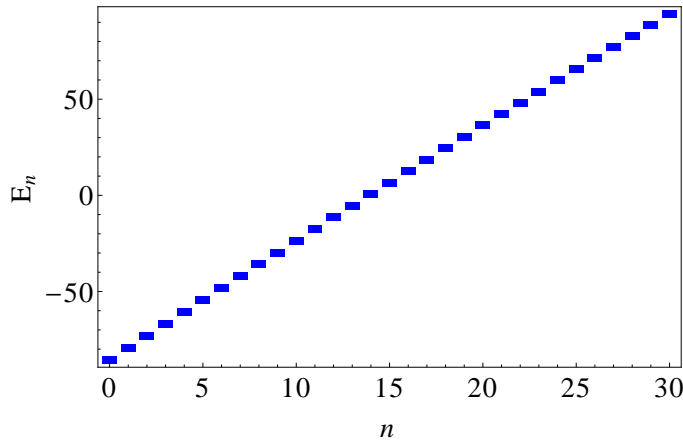


Abbildung 4.4: Das nahezu harmonische Energiespektrum des Bose-Hubbard-Hamiltonians (4.6) im Rabi-Regime für $\Lambda = 0.01$, $N = 30$ und $T = 10$.

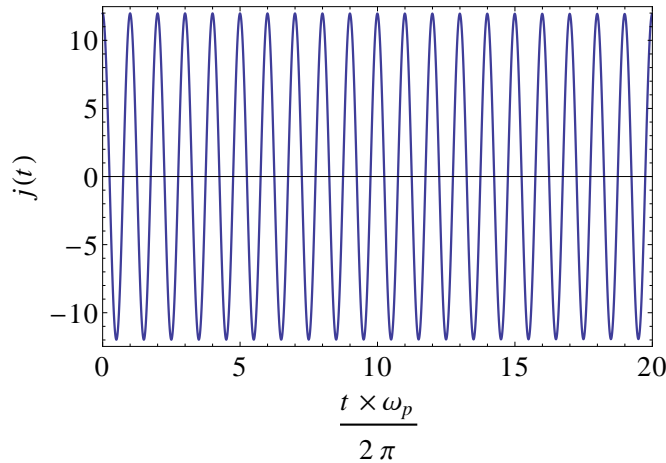


Abbildung 4.5: Dynamik der Populationsdifferenz im Rabi-Regime für $\Lambda = 0.01$, $N = 30$ und $T = 3$ in der Zwei-Moden-Näherung, wobei ω_p die sogenannte Plasmafrequenz ist, die in Abschnitt 4.3.2 hergeleitet wird.

Der Grundzustand im Rabi-Regime ist delokalisiert [68] und durch eine hohe Kohärenz ausgezeichnet, die es erlaubt, eine relative Phase zwischen den Materiewellen in den beiden Töpfen zu definieren. Die klassische Näherung aus dem vorangegangenen Abschnitt 4.2.2 erweist sich also besonders in diesem Regime als sinnvoll.

Fock-Regime

Für sehr große $\Lambda \gg N^2$ befindet sich das Doppelmuldensystem im Fock-Regime. Der dominierende Beitrag im Bose-Hubbard-Hamiltonian (4.6) ist durch die Wechselwirkung gegeben. Die Eigenfunktionen sind in der Anzahl-Basis stark lokalisiert, besetzen also nur wenige Anszahlzustände, und die Kohärenz ist niedrig, so dass eine Phase zwischen den Potentialtöpfen streng genommen nicht zu definieren ist. Das Energiespektrum im Fock-Regime ist dadurch charakterisiert, dass alle Energien als ein Doublet mit symmetrischem und antisymmetrischem Zustand auftreten. Eine Ausnahme macht der Grundzustand bei gerader Gesamtteilchenzahl N . Abbildung 4.6 zeigt ein entsprechendes Energiespektrum für $\frac{\Lambda}{N^2} \approx 14$.

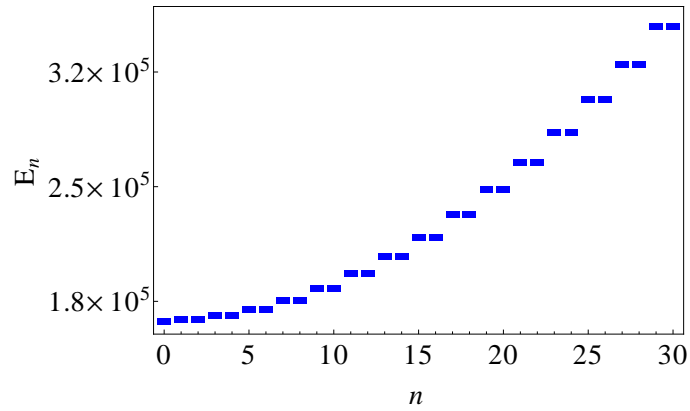


Abbildung 4.6: Das fast ausschließlich aus Doublets bestehende Energiespektrum des Bose-Hubbard-Hamiltonians (4.6) im Fock-Regime für $\Lambda = 1200$, $N = 30$ und $T = 1$.

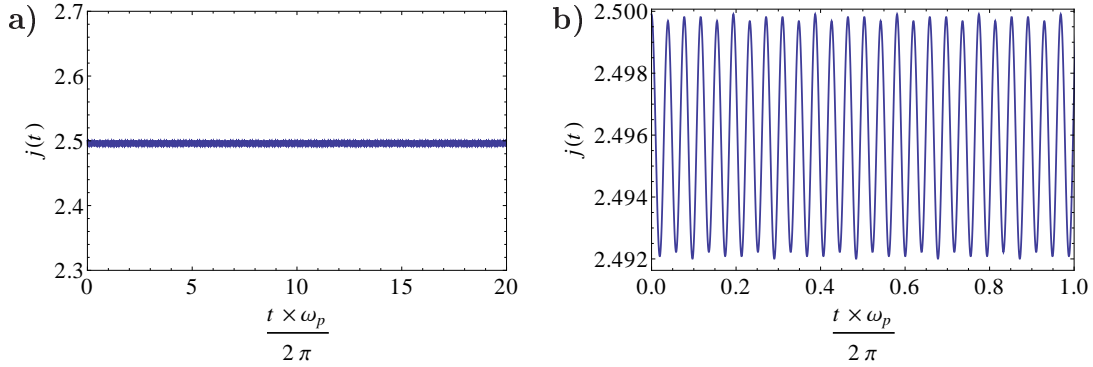


Abbildung 4.7: Dynamik der Populationsdifferenz im Fock-Regime für $\Lambda = 1200$, $N = 30$ und $T = 1$ in der Zwei-Moden-Näherung für verschiedene Zeitskalen.

Die Dynamik im Fock-Regime unterscheidet sich gravierend von derjenigen im Rabi-Regime. Da hier der Anfangszustand einer Superposition zweier entarteter Zustände entspricht, führt dies zu kaum einer oder einer nur sehr langsamen Veränderung in der Zeit, so dass die Populationsdifferenz nahezu konstant bleibt (siehe Abbildung 4.7a)). Lediglich die Energiedifferenz zwischen den Doublets löst eine kleine schnelle Oszillation aus, was in der Abbildung 4.7b) zu sehen ist. Aufgrund der mehr oder weniger konstanten Populationsdifferenz wird dieses Regime auch “Self-Trapping”-Regime (STR) genannt.

Josephson-Regime

Das Josephson-Regime ist unter dynamischen Gesichtspunkten wohl das interessanteste unter den drei Regimen. Es liegt mit dem Wert von Λ im Zwischenbereich mit $1 \ll \Lambda \ll N^2$ und vereint die Eigenschaften von Rabi- und Fock-Regime. Wie im Fock-Regime sind die Eigenzustände im Josephson-Regime in der Anzahlbasis lokalisiert. Die Kohärenz ist jedoch hoch ähnlich wie im Rabi-Regime, so dass eine Phase zwischen den Potentialtöpfen zu definieren ist und die klassische Dynamik zumindest für kurze Zeiten noch eine gute Näherung sein sollte. Das Energiespektrum, das die Eigenschaften der beiden anderen Regime vereint, ist in Abbildung 4.8 dargestellt: Für Energien $E < 2NT$ ist das Spektrum nahezu harmonisch, während es für größere Energien $E > 2NT$ die Doublet-Struktur des Fock-Regimes annimmt. Die Präparation des Anfangszustandes erweist sich also als entscheidend für die Dynamik: Für große Werte der mittleren Energie erfolgt eine “Self-Trapping”-Dynamik, bei der die Populationsdifferenz einen von null verschiedenen Wert annimmt. Kleinere mittlere Anfangsenergien lösen Plasmaoszillationen aus.

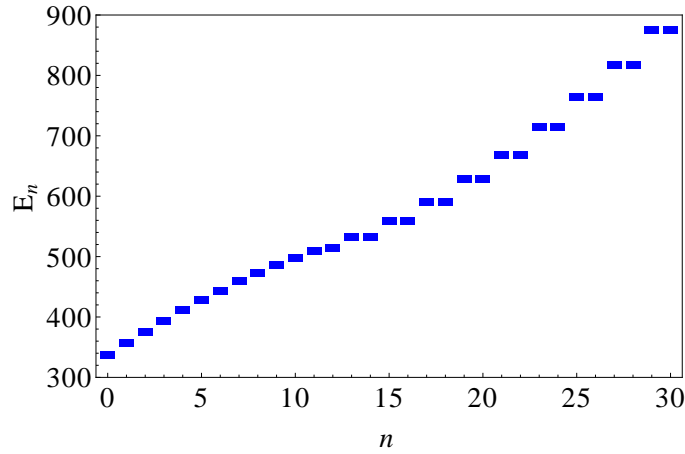


Abbildung 4.8: Das Energiespektrum des Bose-Hubbard-Hamiltonians (4.6) im Josephson-Regime für $\Lambda = 10$ und $N = 30$, $T = 3$, $U = 1$.

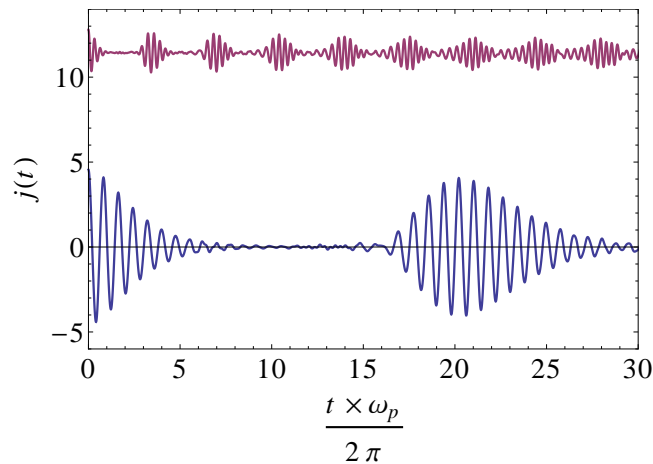


Abbildung 4.9: Dynamik der Populationsdifferenz im Josephson-Regime für $\Lambda = 112.5$, $N = 30$ und $T = 80$ für unterschiedliche Anfangsauslenkungen in der Zwei-Moden-Näherung. Die blaue Linie zeigt eine im Bereich der Plasmaoszillationen gestartete Dynamik und die violette die Dynamik im “Self-Trapping”-Bereich.

Im Gegensatz zum Rabi-Regime ist die Wechselwirkung im Josephson-Regime nicht zu vernachlässigen. Diese bewirkt eine Relaxation des Gases, so dass die Plasmaoszillationen von Sequenzen bestehend aus nahezu gaußförmigen Kollapsen und Revivals überlagert sind. Der Abbildung 4.9 ist unter anderem die Dynamik der Populationsdifferenz zu entnehmen, deren Anfangsbedingung im “Self-Trapping”-Bereich liegt. Diese Dynamik besteht aus von Kollapsen und Revivals überlagerten Oszillationen. Trotzdem ist der stationäre Wert zwischen den Revivals ungleich

null. Die Dynamik einer Anfangsbedingung außerhalb des “Self-Trapping”-Bereichs oszilliert hingegen um $j = 0$ (siehe Abbildung 4.9). In den Bereichen stationärer Populationsdifferenz ist die Anzahl der Atome in den beiden Mulden also ausgeglichen.

Sobald die Anfangsbedingung sowohl im STR als auch im Bereich der Plasmaoszillationen liegt, verliert die Dynamik der Populationsdifferenz ihre klare Struktur. Wird ein Wellenpaket in der Nähe von $E = 2NT$ gestartet, so finden weder harmonische Oszillationen noch Kollapse oder Revivals statt: Die Dynamik ist von unregelmäßigem Charakter. Solch einen Fall zeigt die Abbildung 4.10, für die $\Lambda = 100$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 \approx 10$ gewählt wurden. Der Ursprung dieses Verhaltens soll im folgenden Abschnitt 4.3.2 qualitativ erklärt werden.

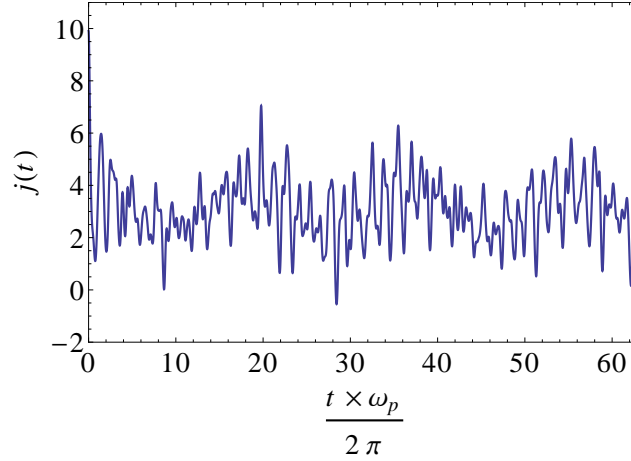


Abbildung 4.10: Dynamik der Populationsdifferenz im Josephson-Regime für $\Lambda = 100$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 \approx 10$ in der Zwei-Moden-Näherung.

Die Heidelberger Gruppe um Professor Oberthaler konnte den Unterschied zwischen Rabi- und “Self-Trapping”-Regime eindrucksvoll experimentell demonstrieren [4]. Abbildung 4.11 zeigt deren Ergebnisse für ultrakalte Bosonen im Doppelmuldenpotential im Josephson-Regime: Je nach anfänglicher Auslenkung befindet sich das System im tunnelnden Regime der Plasmaoszillationen bzw. im STR, in dem die Populationsdifferenz nahezu konstant bleibt.

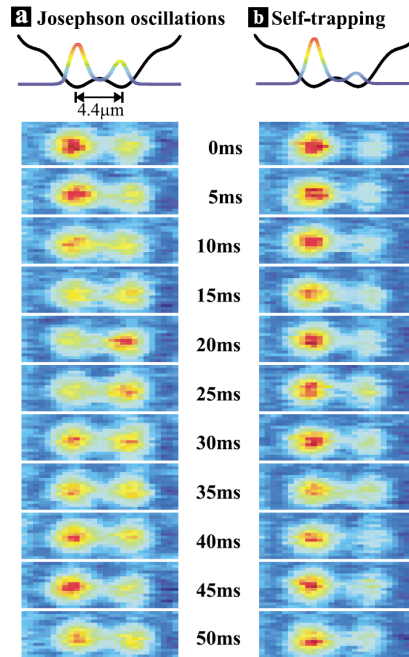


Abbildung 4.11: Josephson-Dynamik zweier schwach gekoppelter Bose-Einstein-Kondensate im symmetrischen Doppelmuldenpotential, gemessen von der Gruppe um Professor Oberthaler (aus [4]). a) Für kleine anfängliche Auslenkungen treten Rabi-Oszillationen auf. b) Für größere Auslenkungen befindet sich das System im “Self-Trapping”-Regime, und die Populationen in den beiden Mulden sind mehr oder weniger konstant.

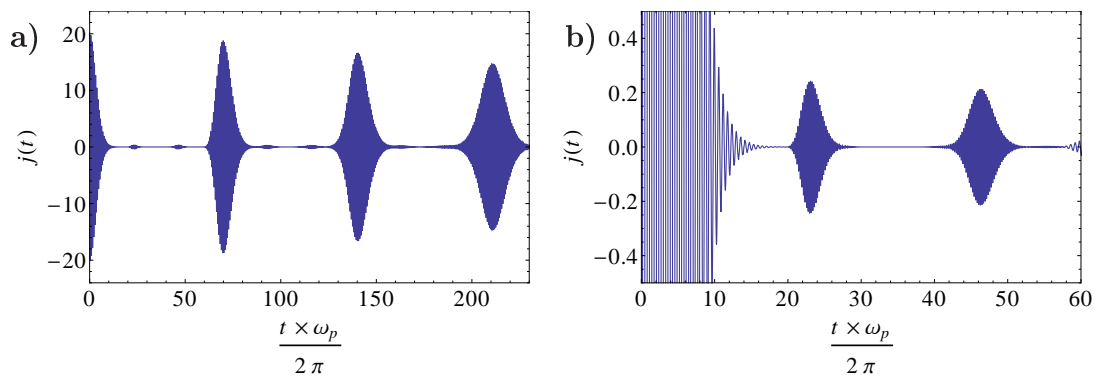


Abbildung 4.12: Dynamik der Populationsdifferenz im Josephson-Regime für $\Lambda = 5$, $N = 100$ und $T = 10$ in der Zwei-Moden-Näherung.

Abbildung 4.12 zeigt die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz für $\Lambda = 5$, also ebenfalls im Josephson-Regime. In diesem Graph werden die Revivals mit wachsender Zeit niedriger und sie verbreitern sich. Bei näherer Betrachtung scheinen die relative Verbreiterung und Abnahme der Revivals mit wachsendem Λ und wachsender Anfangsauslenkung größer zu werden. Weiterhin sind in der Abbildung 4.12 zwischen den Hauptrevivals der Populationsdifferenz kleine Revivals zu erkennen, die in 4.12b) noch einmal im Detail dargestellt sind. Offenbar treten sie ungefähr auf einem Drittel der Zeitskala der primären Revivals auf. In Kapitel 5.4.4 soll dieses Phänomen näher diskutiert werden.

Zusammenfassend betrachtet versprechen das Josephson-Regime selbst und sein Übergangsbereich zum Rabi-Regime dynamisch am interessantesten zu sein, so dass der Fokus in den folgenden Kapiteln auf der Diskussion der Kollapse und Revivals der Populationsdifferenz in diesen Bereichen liegen soll. Es stellt sich z.B. die Frage, ob bei unendlich vielen Freiheitsgraden eine Relaxation in einen dauerhaften stationären Zustand in der Observablen j zu erwarten ist, also kein Revival stattfindet. Von Interesse wäre dann, ob die Form des Kollapses strikt gaußförmig bleibt, oder ob ein exponentieller Zerfall beobachtet werden kann. Weiterhin ist zu untersuchen, wie die Kollaps- und Revivalzeiten mit den Systemparametern N , U und T zusammenhängen. Die Entstehung der Verbreiterung und Abnahme der Revivals und der Ursprung der kleinen Revivals bieten weitere interessante Forschungsansätze.

Zur Klärung dieser Fragen muss offensichtlich über die reine Numerik hinaus gegangen werden. Denn obwohl sich die Dimension des Problems durch die Zwei-Moden-Näherung auf $N + 1$ reduziert, ist die Numerik nur bis zu einer Teilchenzahl von ca. 10000 Atomen sinnvoll durchführbar. Daher wird im folgenden Abschnitt zunächst die zur Zwei-Moden-Näherung äquivalente klassische Dynamik diskutiert.

4.3.2 Klassische Dynamik und deren Darstellung im Phasenraum

Wie in Abschnitt 4.2.2 und 2.2 diskutiert, können die Operatoren im Bose-Hubbard-Hamiltonian (4.6) im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Theorie durch komplexe Zahlen ersetzt werden, vorausgesetzt die Teilchenzahlen sind entsprechend groß und das System befindet sich im Rabi- oder Josephson-Regime, in denen jeweils die Definition einer Phase φ sinnvoll ist. Dieser Schritt führt zu der klassischen Hamiltonfunktion (4.9) und den klassischen Bewegungsgleichungen (4.10) aus Abschnitt 4.2.2. Die resultierende klassische Dynamik wird in der vorliegenden Arbeit als “rein klassisch” bezeichnet, um den Unterschied zur ebenfalls klassischen Dynamik einer ganzen Verteilung im Rahmen der “Truncated Wigner Approximation” herauszustellen. Die rein klassische Dynamik wurde bereits umfassend in der Literatur diskutiert [88, 97, 101, 102, 91, 93, 103, 104]. Zu einer Untersuchung betrachtet

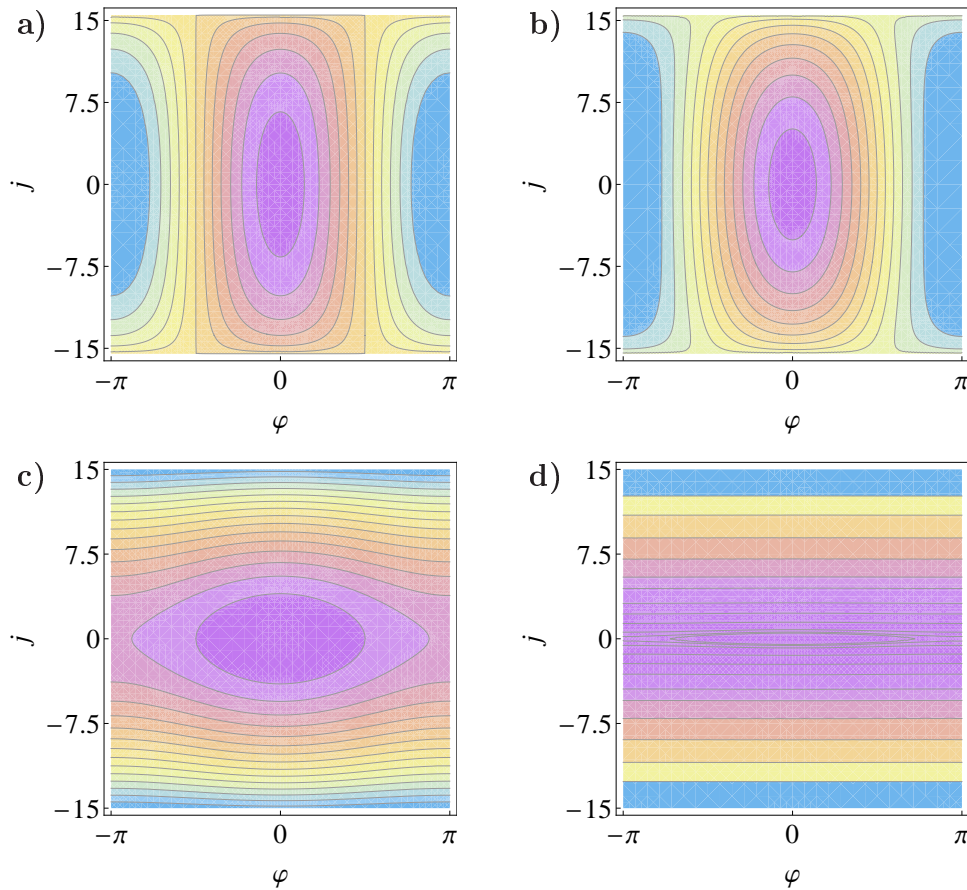


Abbildung 4.13: Phasenräume der Hamiltonfunktion (4.6) für verschiedene Λ :
a) $\Lambda = 0.01$, $N = 30$, $U = 0.001$, b) $\Lambda = 8$, $N = 30$, $U = 0.03$,
c) $\Lambda = 112$, $N = 30$, $U = 300$, d) $\Lambda = 300$, $N = 30$, $U = 400$.

man den Phasenraum sinnvollerweise in Abhängigkeit des Parameters Λ (Abbildung 4.13).

Im Rabi-Regime mit kleinen Wechselwirkungsstärken U ähnelt der Phasenraum dem eines harmonischen Oszillators, da gerade die Wechselwirkung die Nichtlinearität erzeugt – ohne Wechselwirkung würden die Atome ausschließlich mit der sogenannten Plasmafrequenz ω_p durch die Barriere tunneln. Die Plasmafrequenz folgt aus der Entwicklung der Bewegungsgleichungen (4.10) für kleine j und φ [95]. Für kleine j und φ ergibt sich

$$\begin{aligned}\dot{j} &\approx -T(N+1)\varphi \\ \dot{\varphi} &\approx \frac{4T}{(N+1)}(\Lambda+1)j ,\end{aligned}$$

was einem harmonischen Oszillator mit der Frequenz

$$\omega_p = 2T\sqrt{1+\Lambda} \quad (4.15)$$

entspricht. Die resultierende rein klassische Dynamik ist also eine Oszillation auf den Äquipotentialflächen der Hamiltonfunktion (4.9). Abweichend von der rein klassischen Dynamik ist quantenmechanisch eine Wellenfunktion zu propagieren. Im Unterschied dazu ist rein klassisch lediglich eine Trajektorie im Phasenraum zu betrachten, die dem Erwartungswert der Wellenfunktion entspricht. Da der Grundzustand eines harmonischen Oszillators aber gerade gaußsch ist, und ein gaußsches Wellenpaket in einem harmonischen Oszillator seine Form beibehält, sollte die rein klassische Dynamik die exakte Quantendynamik im Rabi-Regime gut reproduzieren. Diese Annahme bestätigt Abbildung 4.14, in der die Gegenüberstellung der Quantendynamik mit der klassischen Dynamik für relativ kleine Wechselwirkungsstärken gezeigt wird. Offensichtlich ist die Dynamik gut mit den klassischen Plasmaoszillationen zu beschreiben.

Beim Übergang zum Josephson-Regime finden zwei wichtige Veränderungen im Phasenraum statt (siehe Abbildung 4.13). Zum einen gewinnt die durch die Wechselwirkung erzeugte Nichtlinearität an Bedeutung, so dass die Dynamik der Populationsdifferenz immer stärker von der eines harmonischen Oszillators abweicht. Wie in Abschnitt 4.3.1 erläutert, durchläuft die Populationsdifferenz eine Sequenz aus Kollapsen und Revivals, hervorgerufen durch die vermehrten Zusammenstöße der Atome. Nun wird aber rein klassisch gesehen eine einzelne Trajektorie im Phasenraum propagiert, deren Dynamik auf die Äquipotentialflächen beschränkt ist (siehe Abbildung 4.13). Die klassischen Bewegungsgleichungen (4.10) können somit keine Zerfälle oder Revivals beschreiben. Diesen Sachverhalt zeigt Abbildung 4.15 – offensichtlich reproduziert die rein klassische Dynamik die exakte Dynamik nur für sehr kurze Zeiten. Die rein klassische Beschreibung lässt sich jedoch verbessern, indem zu einer Verteilung über klassische Trajektorien übergegangen wird, anstatt nur eine einzelne in Betracht zu ziehen. Dieser Schritt steht im Einklang

mit der im Theorieteil 3.3 vorgestellten “Truncated Wigner Approximation”, die in Abschnitt 6.1 im Zusammenhang mit dem bosonischen Doppelmuldenpotential Anwendung finden wird.

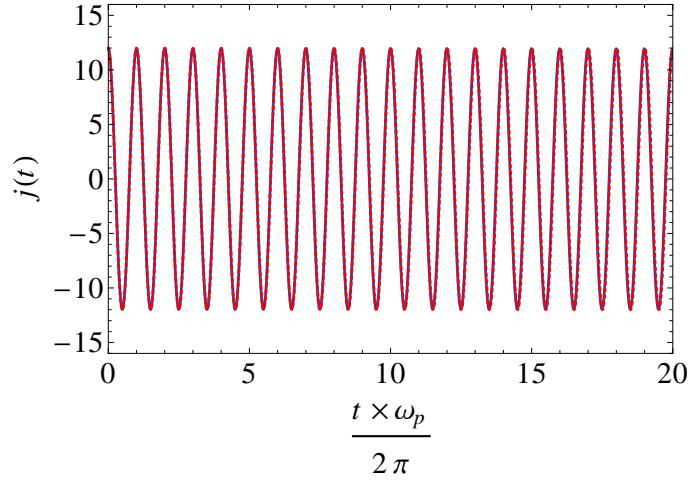


Abbildung 4.14: Rein klassische (rot gestrichelt) und Quantendynamik (blau durchgezogen) im Rabi-Regime für $\Lambda = 0.01$, $N = 30$ und $U = 0.001$.

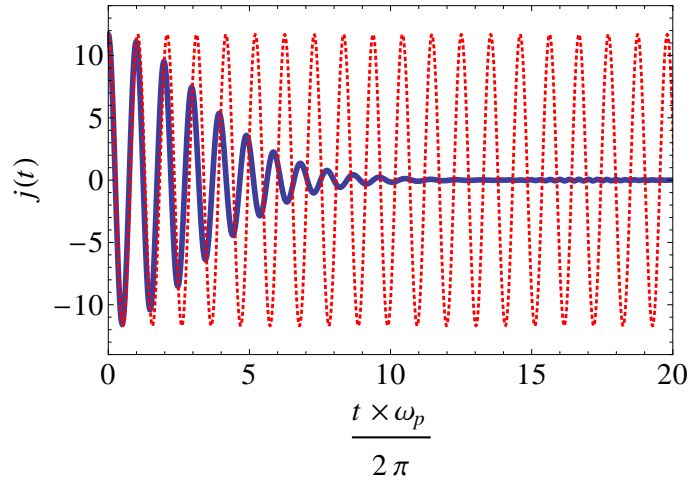


Abbildung 4.15: Vergleich der rein klassischen (rot gestrichelt) und Quantendynamik (blau durchgezogen) im Bereich zwischen Rabi- und Josephson-Regime für $\Lambda = 1$, $N = 30$ und $T = 3$ in der Zwei-Moden-Näherung.

Was aber geschieht quantenmechanisch im Phasenraum? Wie kommen die Kollapse und Revivals zustande? Zur Veranschaulichung erfolgt abweichend von der Publikation [105], in der die Husimifunktion untersucht wird, die Betrachtung der

Wignerfunktion (2.16), die bekanntlich eine Wellenfunktion ψ im dazugehörigen klassischen Phasenraum abbildet. In der diskreten Anzahl-Phasen-Darstellung ergibt sich [106]

$$W(\varphi, n) = \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-n}^n \psi^*(n+k) \psi(n-k) e^{-2i\varphi k} . \quad (4.16)$$

Abbildung 4.16 zeigt die Zeitentwicklung der Wignerfunktion im Bereich zwischen Rabi- und Josephson-Regime für $\Lambda = 1$. Zur Orientierung dient die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz im unteren Teil der Abbildung. Als Anfangszustand ψ_0 wurde der Grundzustand des gekippten Systems gewählt, also ein nahezu kohärenter Zustand. Mit voranschreitender Zeit bewegt sich das Wellenpaket für einige Oszillationen mehr oder weniger auf den Äquipotentialflächen des klassischen Phasenraums (vgl. Abbildung 4.13), was zu den anfänglichen Oszillationen der Populationsdifferenz führt (Abbildungen 4.16a) bis 4.16f)) mit einer Periode von $t = 0$ bis $t = 0.8$. Im weiteren Verlauf zerfließt das Wellenpaket allerdings und verteilt sich über den Phasenraum (Abbildung 4.16g) bis 4.16j)). Dies entspricht der Equilibrierung der Populationsdifferenz hin zu einem stationären Wert. Jedoch wird offensichtlich kein echter Gleichgewichtszustand erreicht, da das verschmierte Wellenpaket sich weiterhin im Phasenraum bewegt und lediglich reduzierte Größen wie die Populationen in den Töpfen einen stationären Wert annehmen. Zum Zeitpunkt $t = 43.65$ scheint die Abfolge erneut einzusetzen: Die Populationsdifferenz durchläuft ein Revival. Das Wellenpaket sammelt sich nahezu im anfänglichen Zustand (Abbildung 4.16k)), um dann erneut für einige Zeit im Phasenraum zu oszillieren. Die Wellenfunktion durchläuft eine unendliche Sequenz von Oszillationen, Kollaps und Revival.

Die zweite bedeutende Veränderung des Phasenraums für wachsendes Λ liegt im Auftreten einer Bifurkation (siehe Abbildung 4.13b) und c)), welche mit $\Lambda = 1$ einsetzt [30]. Es bilden sich zwei hyperbolische Fixpunkte bei $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$ und $j = 0$, deren Separatrix den “Self-Trapping”-Bereich vom Bereich der Rabi-Oszillationen trennt. Trajektorien, die im “Self-Trapping”-Bereich starten, oszillieren nicht um den Ursprung des Phasenraums, und die Populationsdifferenz erreicht einen endlichen stationären Wert, wie in Abschnitt 4.3.1 erläutert. Weiter konnte gezeigt werden [107, 108], dass die Quantendynamik offenbar zwischen elliptischen stabilen Fixpunkten und hyperbolischen instabilen Fixpunkten unterscheidet: Sie folgt der rein klassischen Dynamik an den stabilen und divergiert an den instabilen Fixpunkten. Je näher ein Wellenpaket also den hyperbolischen Fixpunkten im Phasenraum kommt, desto schlechter sollten die rein klassische Beschreibung und die auf den klassischen Gleichungen basierenden Methoden in ihren Aussagen werden. Die Existenz der hyperbolischen Fixpunkte erklärt zudem die unregelmäßige Dynamik der Populationsdifferenz für Wellenpakete, die in die nähere Umgebung der Fixpunkte hineinlaufen (also in der Nähe der Separatrix gestartet werden), was bereits in Abschnitt 4.3.1 beobachtet wurde. Dieses Verhalten ist der Abbildung 4.17 zu

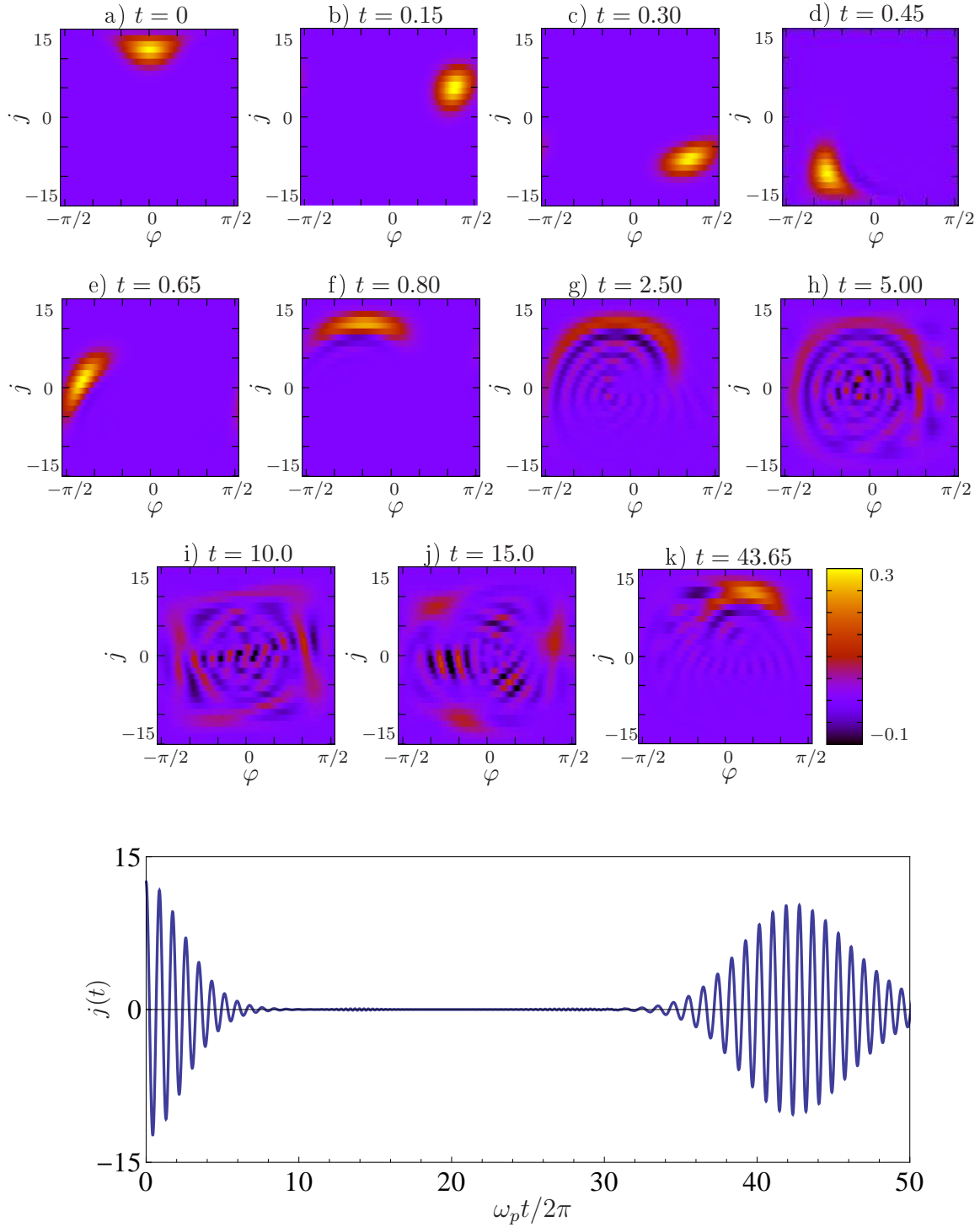


Abbildung 4.16: Die Wignerverteilung zu unterschiedlichen Zeitschritten für $\Lambda = 1$, $N = 30$, $U = 0.1$. Die Graphiken a) bis f) zeigen, dass das anfängliche Wellenpaket zunächst auf den Äquipotentialflächen im Phasenraum (siehe Abbildung 4.13) oszilliert. Nach einigen Oszillationen verteilt sich die Wellenfunktion aufgrund der Nichtlinearität jedoch über den Phasenraum (Graphiken g) bis j)), so dass die Populationsdifferenz gleich null wird. Bei $t = 43.65$ findet das Revival in der Abbildung k) statt. Die untere Abbildung zeigt die dazugehörige Zeitentwicklung der Populationsdifferenz.

entnehmen, die einen Vergleich der numerisch exakten Ergebnisse mit der rein klassischen Dynamik zeigt: Hier wurde ein Wellenpaket im STR, jedoch nahe am Bereich der Plasmaoszillationen, gestartet, was in der Abbildung 4.17 unten zu sehen ist. Die resultierende Dynamik weist keine reguläre Struktur auf (in der Abbildung 4.17 oben), so dass die klassischen Bewegungsgleichungen (4.10) die Dynamik selbst auf sehr kleinen Zeitskalen nicht beschreiben können.

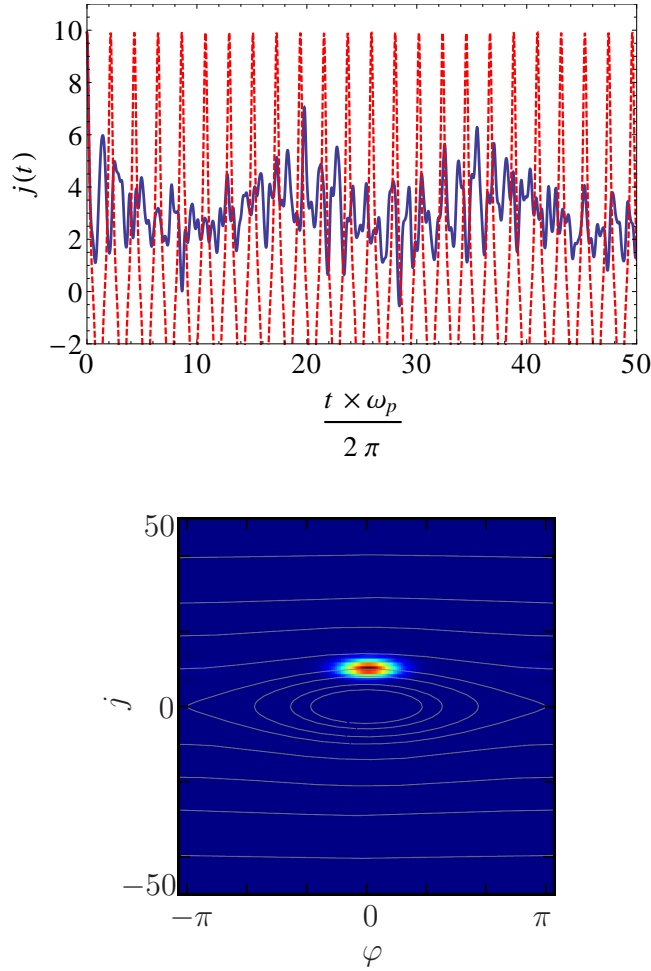


Abbildung 4.17: Vergleich der rein klassischen (rot gestrichelt) und Quantendynamik (blau durchgezogen) im Josephson-Regime für $\Lambda = 100$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 \approx 10$ in der Zwei-Moden-Näherung (oben). Darunter ist die Wignerfunktion der dazugehörigen anfänglichen Wellenfunktion im Phasenraum zu sehen. Die grauen Linien stellen Äquipotentialflächen der Hamiltonfunktion 4.9 dar.

Wie in der Abbildung 4.13c) gut zu sehen ist, steigt für wachsendes Λ der Anteil des “Self-Trapping”-Bereichs am Gesamtphasenraum. Die Phasenraumstruktur liefert somit auch eine qualitative Erklärung des Energiespektrums im Josephson-Regime: Die mehr oder weniger linearen Eigenwerte im unteren Bereich des Spektrums entsprechen dem inneren “normalen” Bereich der Plasmaoszillationen im Phasenraum, die Doublets hingegen dem “Self-Trapping”-Bereich. Da dieser den normalen Bereich symmetrisch umschließt, treten die dazugehörigen Eigenwerte in Doublets auf.

Als Ergebnis ist festzuhalten, dass die rein klassische Dynamik die exakte Dynamik im Josephson-Regime zwar nur für sehr kurze Zeiten beschreibt, jedoch wichtige qualitative Erkenntnisse liefert, vor allem zur Form des Energiespektrums und zur genannten Bifurkation.

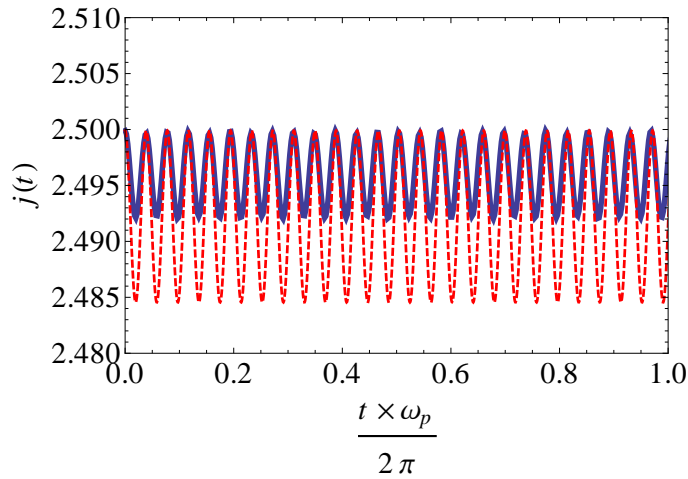


Abbildung 4.18: Vergleich der klassischen (rot gestrichelt) und Quantendynamik (blau durchgezogen) im Fock-Regime für $\Lambda = 12000$, $N = 30$ und $U = 400$.

Im Fock-Regime füllt den Phasenraum nahezu vollständig der “Self-Trapping”-Bereich (Abbildung 4.13d)). Obwohl die Definition einer Phase φ aufgrund der fehlenden Kohärenz streng genommen nicht mehr sinnvoll ist, lässt sich die Dynamik – anders als im Josephson-Regime – wieder sowohl qualitativ als auch quantitativ mit Hilfe der klassischen Dynamik beschreiben (siehe Abbildung 4.18).

Summa summarum gibt die klassische Näherung im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Theorie die exakte Quantendynamik für die beiden extremen Rabi- und Fock-Regime sehr genau wieder, versagt jedoch im dynamisch interessanten Josephson-Regime. Indem die Gross-Pitaevskii-Theorie lediglich Erwartungswerte behandelt, sind mit ihr keine nicht-trivialen Aussagen über den vollen N -Teilchenzustand zu machen. Trotzdem ist die rein klassische Beschreibung in Teilaspekten auch im Josephson-Regime erfolgreich, indem sie hilft, prinzipielle Fragen zu klären und Aufschluss über bestimmte Sachverhalte zu geben, wie z.B. den Übergang zum “Self-Trapping”-Regime und die Struktur des Energiespektrums. Um die charakteristische, aus Oszillationen, Zerfällen und Revivals bestehende Dynamik im Josephson-Regime beschreiben zu können, muss die Gross-Pitaevskii-Theorie jedoch erweitert werden, was einen semiklassischen Ansatz nahe legt. Dieser wird im folgenden Kapitel eingeführt und diskutiert.

5 Semiklassische Beschreibung der Dynamik im Doppelmuldenpotential

Gemäß der Herleitung in Abschnitt 4.3.2 lässt sich die exakte Dynamik der Populationsdifferenz im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung schreiben als

$$\langle j(t) \rangle = \sum_{n,m} A_{nm} e^{-i(E_n - E_m)t} .$$

Gäbe es einen analytischen Ausdruck für die Eigenenergien und die Matrix A_{nm} , so wäre im Prinzip auch die Dynamik der Populationsdifferenz unabhängig von der Größe des Systems bekannt. Daher soll es das Ziel der folgenden Abschnitte sein, mithilfe semiklassischer Methoden einen entsprechenden Ausdruck für die Matrix A_{nm} und das Energiespektrum herzuleiten, um Aussagen über die Dynamik im Allgemeinen und die Relaxation in den reduzierten Größen im Besonderen treffen zu können.

5.1 WKB-Näherung zur Bestimmung des Spektrums

Zur Berechnung des Energiespektrums des Bose-Hubbard-Hamiltonians (4.6) wird die WKB-Näherung aus Abschnitt 3.1 Anwendung finden, wie sie in [45] vorgestellt wurde. Mit ihrer Hilfe wurden schon die semiklassischen Wellenfunktionen [109] und die Energiestruktur in der Nähe der Fixpunkte [90, 110], sowie diejenige für den wechselwirkungsfreien Grenzfall [98] und für den konkreten Fall $\Lambda = 1$ [111] untersucht. Hier soll allerdings über diese Sonderfälle hinausgegangen werden, um zu möglichst allgemeinen Aussagen über das Energiespektrum zu gelangen. Ausgangspunkt der Überlegungen ist wieder die klassische Hamiltonfunktion (4.6) aus Abschnitt 4.2.2. Für diese werden nun – so wie in [45] – Potentialkurven $V^-(j)$ und $V^+(j)$ eingeführt, die den Bereich klassisch erlaubter Energien einschließen.

Offensichtlich wird $H(j, \varphi)$ (4.6) in Abhängigkeit von φ gerade minimal für $\varphi = 0$ und maximal für $\varphi = \pi$. Für die Potentialkurven ergibt sich

$$V^-(j) = H(0, j) = T(N+1) + 2Uj^2 - 2T\sqrt{\frac{(N+1)^2}{4} - j^2}$$

$$V^+(j) = H(\pi, j) = T(N+1) + 2Uj^2 + 2T\sqrt{\frac{(N+1)^2}{4} - j^2},$$

wobei die Energieskala so gewählt wurde, dass $V^-(j=0) = 0$. Aus der Form der Potentialkurven ist leicht die Art des Energiespektrums und der Übergang vom Rabi- in das Josephson- bzw. Fock-Regime abzulesen, wie in Abbildung 5.1 zu sehen. Diese zeigt die Potentialkurven für verschiedene Werte von Λ mit den dazugehörigen Eigenenergien. Für kleine Λ fällt der $2Uj^2$ -Term in den Potentialen

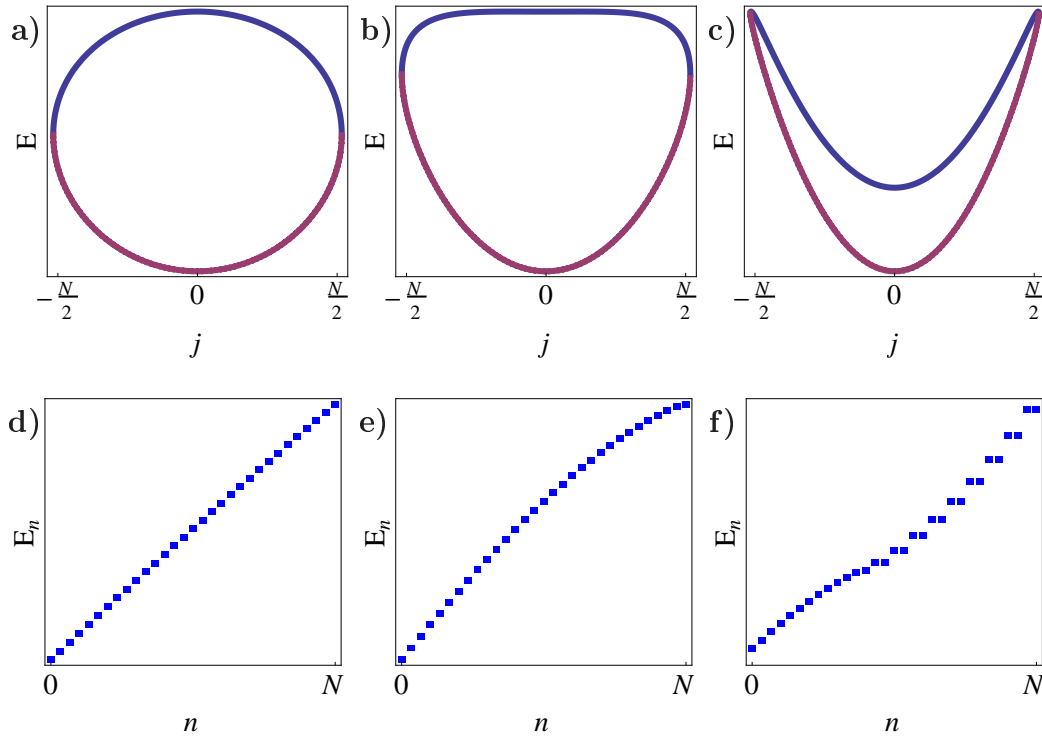


Abbildung 5.1: Die Potentialkurven $V^+(j)$ (blau) und $V^-(j)$ (violett) für unterschiedliche Λ : a) $\Lambda = 0.1$, b) $\Lambda = 1$ und c) $\Lambda = 10$. Zum Vergleich die dazugehörigen Energiespektren für d) $\Lambda = 0.1$, e) $\Lambda = 1$ und f) $\Lambda = 10$. Die Doublets im Energiespektrum sind die Folge davon, dass V^+ ein Minimum an der Stelle $j = 0$ durchläuft, so dass für eine feste Energie $E > V^+(0)$ zwei mögliche klassische Bahnen existieren.

noch nicht ins Gewicht, so dass sich V^+ und V^- nur im Vorzeichen unterscheiden (siehe Abbildung 5.1a)). Hier gleicht das Energiespektrum im Rabi-Regime

dem eines harmonischen Oszillators. Mit wachsendem Λ verformt sich die Potentialkurve V^+ zunehmend und lässt insbesondere den oberen Teil des Spektrums von dem eines harmonischen Oszillators abweichen. Für $\Lambda = 1$ entsteht die im Kapitel 4.3.2 erwähnte Bifurkation: Bei $\Lambda > 1$ durchläuft die obere Potentialkurve an der Stelle $j = 0$ ein Minimum. Daher existieren für eine feste Energie $E > V^+(0) = 2(N+1)T$ zwei mögliche klassische Trajektorien, was zu dem Auftreten der Doublets im oberen Teil des Energiespektrums führt (siehe Abbildung 5.1c) und f)). Die semiklassische Betrachtung kann also sehr anschaulich klären, warum die Grenze zwischen “Self-Trapping”-Bereich und dem der Plasmaoszillationen bei $E = 2(N+1)T$ liegt, worauf in Abschnitt 4.3.1 hingewiesen wurde. Größer werdendes Λ lässt das Minimum stetig tiefer werden und den Energiebereich, in dem zwei klassische Bahnen existieren, mithin also den Anteil der Doublet-Struktur am Energiespektrum, wachsen.

Für eine semiklassische WKB-Näherung ist die klassische Wirkung von Bedeutung, die im Zuge der Näherung quantisiert wird. Der Wirkung $S(E)$ entspricht gerade der durch eine Äquipotentialkurve eingeschlossene Phasenraumbereich, so dass die Wirkung mit der Energie von null am Minimum der Hamiltonfunktion (4.6) bis auf $2\pi(N+1)$ an ihrem Maximum wächst. Letzteres entspricht gerade der gesamten verfügbaren Phasenraumfläche. Die Wirkung wird folgendermaßen quantisiert [45]

$$S = \oint \varphi(j, E) dj = 4 \int_0^{j_+(E)} \arccos \left(\frac{E - T(N+1) - 2Uj^2}{2T\sqrt{\frac{(N+1)^2}{4} - j^2}} \right) dj \stackrel{!}{=} 2\pi n + \pi . \quad (5.1)$$

In dieser Relation ist n die Quantenzahl, und $\varphi(j, E)$ folgt aus dem Umstellen der Hamiltonfunktion (4.6) zu fester Energie E nach φ . Die Energieskala wurde so gewählt, dass die Wirkung an der Stelle $E = 0$ null ist. Die obere Integrationsgrenze $j_+(E)$ entspricht dem positiven klassischen Umkehrpunkt auf der entsprechenden Potentialkurve. Dieser wird aus der quadratischen Gleichung in j^2 bestimmt, welche aus der Bedingung folgt, dass die klassische Geschwindigkeit v_{kl} null wird

$$v_{kl} = \pm \sqrt{(V^+(j) - E)(E - V^-(j))} \stackrel{!}{=} 0 .$$

Es ergibt sich

$$(j^2)_{\pm}(E) = \frac{1}{2U^2} \left((EU - (\omega_p/2)^2) \pm \sqrt{(\omega_p/2)^4 - EU\omega_p^2/(2(1+\Lambda))} \right) . \quad (5.2)$$

Für das Regime, in dem Plasmaoszillationen auftreten, sind die relevanten Umkehrpunkte $\pm j_+(E)$. Die weiteren Umkehrpunkte $\pm j_-(E)$ werden erst für $\Lambda > 1$ reell und liegen auf der oberen Potentialkurve V^+ . Sie entsprechen den zusätzlich möglichen Umkehrpunkten für den Fall, dass die Potentialkurve V^+ ein Minimum um

$j = 0$ entwickelt, und sind für das Regime der Plasmaoszillationen nicht relevant, da in diesem lediglich kleinere Energien angeregt sind. Für $E \rightarrow 0$ geht j_+ ebenfalls gegen null, während j_- gegen eine Konstante geht, nämlich $j_- \rightarrow -(\omega_p/(2U))^2$.

Das Integral in Ausdruck (5.1) ist nur numerisch zu lösen. Mit seiner Hilfe können die exakten Energieeigenwerte bereits ab einer Teilchenzahl von ungefähr $N = 10$ sehr gut reproduziert werden [98], obwohl die Semiklassik eher für große Teilchenzahlen gute Ergebnisse liefern sollte. Andererseits war es die Zielsetzung, einen analytischen Ausdruck für das Energiespektrum herzuleiten. Da das Integral in (5.1) nicht ohne weiteres analytisch zu lösen ist, sind weitere Vereinfachungen vorzunehmen.

Im ersten Schritt wird die Ableitung des Integrals in Abhängigkeit der Energie betrachtet mit

$$\frac{\partial S}{\partial E} = 4 \int_0^{j_+(E)} \frac{dj}{\sqrt{-4U^2j^4 + 4(EU - TU(N+1) - T^2)j^2 + 2T(N+1)E - E^2}}. \quad (5.3)$$

Durch Substitution von $\lambda = j/j_-$ kann vereinfacht werden zu

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{2}{U|j_-(E)|} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\sqrt{(1-\lambda^2)(1-\kappa^2\lambda^2)}}, \quad (5.4)$$

mit $\kappa^2 = (j_+)^2/(j_-)^2$ und $(j_+)^2$ und $(j_-)^2$ aus (5.2). Auch diese Ableitung des Integrals (5.1) nach der Energie ist analytisch nicht zu lösen. Da hier das Regime der Plasmaoszillationen betrachtet werden soll, also der Bereich kleiner Energien, werden im Folgenden $1/|j_-(E)|$ und κ für kleine Energien E entwickelt. Es ergibt sich

$$\kappa \approx -\frac{2U\Lambda}{\omega_p^2(1+\Lambda)}E + \frac{4U^2(1-2\Lambda-\Lambda^2)}{\omega_p^4(1+\Lambda)^2}E^2 + \dots \quad (5.5)$$

und

$$\frac{1}{U|j_-(E)|} \approx \frac{2}{\omega_p} + \frac{2U(2+\Lambda)}{\omega_p^3(1+\Lambda)}E + \frac{2^4U^2(1+\frac{3}{4}\Lambda+\frac{3}{16}\Lambda^2)}{\omega_p^5(1+\Lambda)^2}E^2 + \dots \quad (5.6)$$

Andererseits kann $(1-\kappa^2\lambda^2)$ unter der Wurzel im Integral (5.4) für kleine κ (und damit auch für kleine E) entwickelt werden

$$(1-\lambda^2\kappa^2) \approx 1 + \frac{1}{2}\lambda^2\kappa^2 + \frac{3}{8}\lambda^4\kappa^4 + \dots,$$

so dass

$$\frac{\partial S}{\partial E} \approx \frac{2}{U|j_-(E)|} \left(\underbrace{\int_0^1 \frac{d\lambda}{\sqrt{1-\lambda^2}}}_{\pi/2} + \frac{1}{2}\kappa^2 \underbrace{\int_0^1 \frac{d\lambda \lambda^2}{\sqrt{1-\lambda^2}}}_{\pi/4} + \frac{3}{8}\kappa^4 \underbrace{\int_0^1 \frac{d\lambda \lambda^4}{\sqrt{1-\lambda^2}}}_{3\pi/16} + \dots \right).$$

Für diese Integrale sind analytische Lösungen bekannt. Durch Einsetzen von (5.5) und (5.6) folgt schließlich

$$\frac{\partial S}{\partial E} = \frac{2\pi}{\omega_p} + 4\pi \frac{U(1+\Lambda/4)}{\omega_p^3(1+\Lambda)} E + 6\pi \frac{3U^2(1+\Lambda/3+(\Lambda/4)^2)}{\omega_p^5(1+\Lambda)^2} E^2 + \dots \quad (5.7)$$

und damit gilt für das Energiespektrum

$$n(E) = S(E)/2\pi - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2} + \frac{1}{\omega_p} E + \frac{U(1+\Lambda/4)}{\omega_p^3(1+\Lambda)} E^2 + \frac{3U^2(1+\Lambda/3+(\Lambda/4)^2)}{\omega_p^5(1+\Lambda)^2} E^3 + \dots \quad (5.8)$$

Wie zu erwarten ist der lineare Teil des Spektrums offensichtlich proportional zu ω_p . Allerdings tragen zusätzlich Korrekturterme bei, die für wachsendes Λ bzw. wachsende Wechselwirkungsstärke U an Bedeutung zunehmen. Für $\Lambda \rightarrow 0$ bleibt nur der lineare Term bestehen: Es ergibt sich das Energiespektrum des harmonischen Oszillators. Der Ausdruck (5.8) zeigt weiterhin, dass die Entwicklung in E offenbar eine Entwicklung in dem dimensionslosen Parameter

$$\varepsilon = \frac{UE}{\omega_p^2} = \frac{1}{2} \frac{\Lambda}{1+\Lambda} \left(\frac{E}{V^+(0)} \right) \quad (5.9)$$

ist, denn $V^+(0) = 2T(N+1)$. Somit ist das Ergebnis für das Spektrum im Bereich der Plasmaoszillationen (unabhängig von Λ) gültig, also für den Energiebereich unterhalb des Minimums von V^+ mit $E < V^+(0)$. Zur Veranschaulichung wurden in Abbildung 5.2 die numerisch exakten Spektren dem analytischen Ausdruck (5.8) bis zur dritten Ordnung in E für verschiedene Λ gegenüber gestellt. Offensichtlich ist das Energiespektrum mithilfe des analytischen Ausdrucks (5.8) für kleine Λ nahezu exakt zu beschreiben (siehe Abbildung 5.2a)). In diesem Bereich nehmen der quadratische Term und derjenige dritter Ordnung sehr kleine Werte an, und es dominiert der lineare harmonische Anteil, der proportional zur Plasmafrequenz ist. Bei $\Lambda = 1$ tritt eine langsame Verformung des Spektrums ein, das mit der Formel (5.8) jedoch noch adäquat beschrieben wird (Abbildung 5.2b)). Für weiter wachsendes Λ ist der analytische Ausdruck im Energiebereich der Plasmaoszillationen (also im Bereich der nichtentarteten Eigenenergien) eine gute Näherung, wie in der Abbildung 5.2c) zu sehen ist. Die Doubletstruktur hingegen, die gerade dem "Self-Trapping"-Bereich oberhalb von $E > V^+(0)$ entspricht (in der Abbildung 5.2c) als graue gestrichelte Linie dargestellt), kann mithilfe der bis zur dritten Ordnung

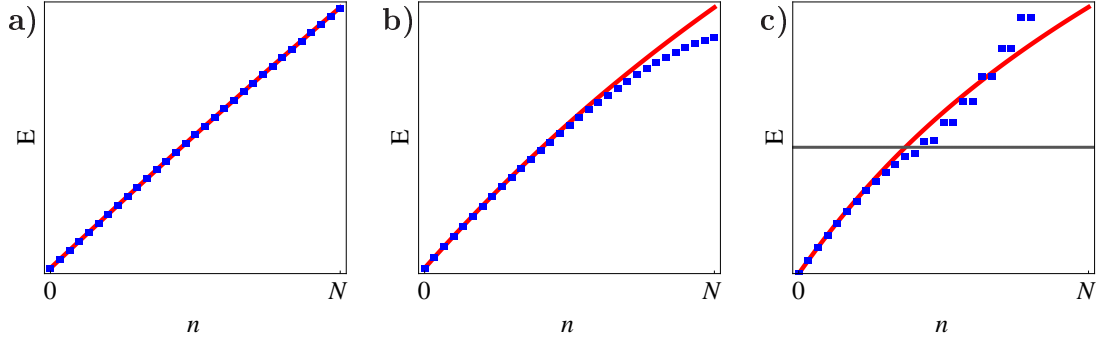


Abbildung 5.2: Gegenüberstellung der numerisch exakten (blau) und semiklassisch bis zur dritten Ordnung in E genäherten (rot) Energiespektren für verschiedene Λ : a) $\Lambda = 0.1$, b) $\Lambda = 1$, c) $\Lambda = 10$, mit jeweils $N = 30$ und $T = 3$. In c) zeigt die graue Linie bei $E = 2T(N + 1)$ die Grenze zwischen dem STR und dem Bereich der Plasmaoszillationen.

in E berücksichtigten Terme der Gleichung (5.8) offensichtlich nur sehr ungenau reproduziert werden. Zu verbessern wäre dieses Ergebnis für Energien $\leq V^+(0)$ durch das Berücksichtigen höherer Ordnungen in der Energie.

Im Folgenden wird allerdings vom Plasmaoszillationsregime ausgegangen mit $E < V^+(0)$: In diesem ist der analytische Ausdruck des Energiespektrums (5.8) für alle in der Abbildung 5.2 gezeigten Werte von Λ nahezu exakt.

5.2 Die Matrix A_{nm}

Da nun das Energiespektrum näherungsweise bekannt ist, gilt es noch, einen analytischen Ausdruck für die Matrix A_{nm} (4.13) in der Zeitentwicklung der Populationsdifferenz (4.12) zu finden. In A_{nm} sind die Anfangsbedingung (mittels der Koeffizienten b_n und b_m^*) und Matrixelemente der Form $\langle \phi_m | \hat{j} | \phi_n \rangle$ enthalten. Die Abbildung 5.3 zeigt die Matrix für verschiedene Werte von Λ . Nach 5.3a) und 5.3b) sind bei kleinem Λ lediglich die ersten beiden Nebendiagonalen besetzt ($m = n \pm 1$). Für wachsendes Λ kommen weitere Beiträge auf den höheren ungeraden Nebendiagonalen hinzu (5.3c)), während die Diagonale und die geraden Nebendiagonalen ohne Einträge bleiben. Mit großem Λ und besonders unter Anfangsbedingungen, die den “Self-Trapping”-Bereich tangieren (5.3d)), verliert die Matrix A_{nm} ihre Regelmäßigkeit.

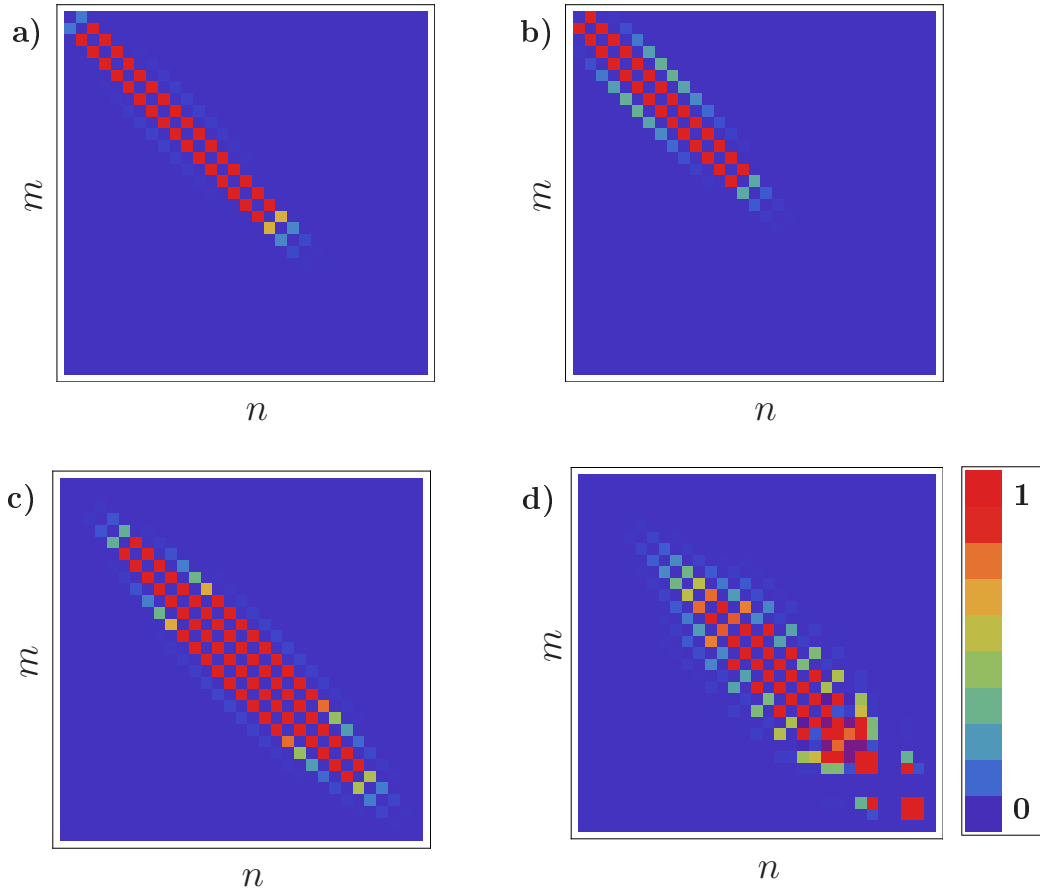


Abbildung 5.3: Die Matrix A_{nm} (4.13) für $N = 30$, $T = 3$ und verschiedene Λ :
a) $\Lambda = 0.1$, b) $\Lambda = 0.5$, c) $\Lambda = 1$, d) $\Lambda = 10$. Dabei steht dunkelblau für den Wert null und rot für das jeweilige Maximum.

Dass die Diagonalelemente und die Elemente der geraden Nebendiagonalen identisch null sind, wird nach einer näheren Betrachtung des Ausdrucks

$$\langle \phi_m | \hat{j} | \phi_n \rangle = \sum_{l=0}^N (2l - N) \langle \phi_m | l \rangle \langle l | \phi_n \rangle$$

mit den Eigenfunktionen $|\phi\rangle$ des Bose-Hubbard-Hamiltonians (4.6) klar. Aufgrund der Symmetrie der Eigenfunktionen und des Faktors $(2l - N)$ in der Summe kann dieser Ausdruck keine Beiträge auf der Diagonalen und allen geraden Nebendiagonalen hervorbringen.

Zur Diskussion der ungeraden Nebendiagonalen soll im Folgenden ein harmonischer Oszillator betrachtet werden. Für diesen sind die Eigenfunktionen im Ortsraum

die Hermiteschen Polynome $H_n(j)$ [112], die bekanntlich der Rekursionsrelation gehorchen [113]

$$jH_n(j) = \frac{1}{2}H_{n+1}(j) + nH_{n-1}(j) .$$

Einsetzen derselben in $\langle \phi_m | \hat{j} | \phi_n \rangle$ führt offensichtlich zu einer Summe von Kronecker-Deltas $\delta_{m,n+1}$ und $\delta_{m,n-1}$. In der Folge besitzt die Matrix A_{nm} für einen harmonischen Oszillator exakt nur Einträge auf den ersten Nebendiagonalen. Lässt sich das System mit einem harmonischen Oszillator vergleichen, wie es für kleine Λ der Fall ist, so ist die Matrix mithilfe der Elemente $A_{n,n\pm 1}$ vollständig beschrieben. Mit wachsendem Λ nimmt die Abweichung von einem harmonischen Oszillator zu: Es existieren immer mehr Einträge auf den höheren ungeraden Nebendiagonalen, wie es in Abbildung 5.3 zu sehen ist. Allerdings gehorchen die Einträge einer strengen Hierarchie

$$|A_{nn+1}| \gg |A_{nn+3}| \gg |A_{nn+5}| \gg \dots , \quad (5.10)$$

so dass der Hauptbeitrag zur Dynamik von den ersten Nebendiagonalen herrührt. Eine genauere Betrachtung der ungeraden Nebendiagonalen in Abhängigkeit von

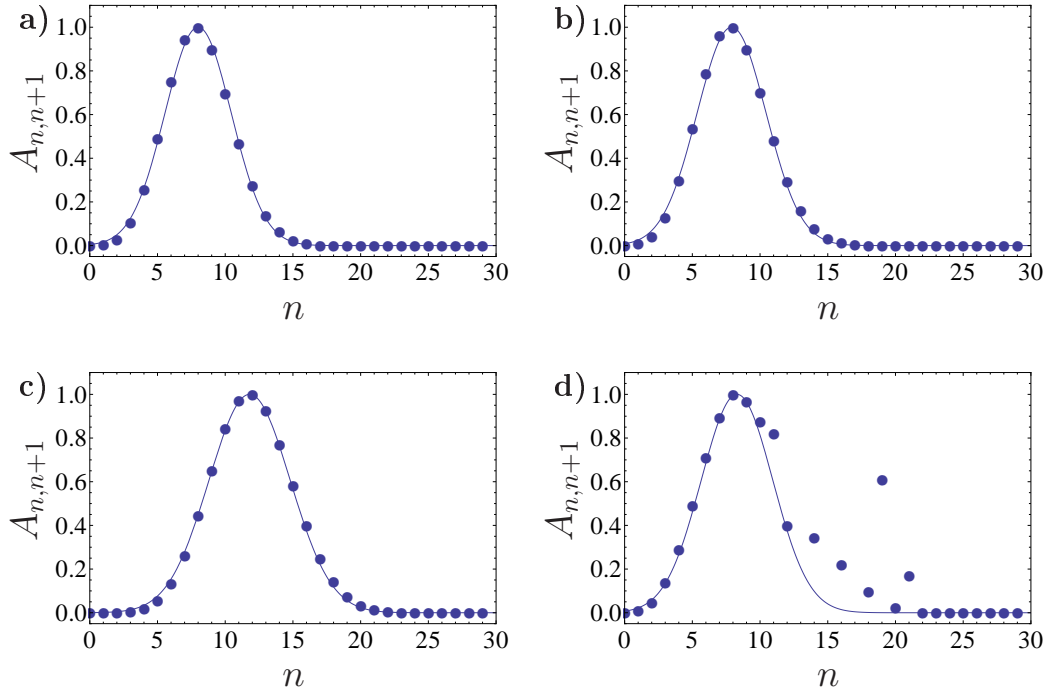


Abbildung 5.4: Die numerisch bestimmte erste Nebendiagonale der Matrix A_{nm} (4.13) für $N = 30$, $T = 3$ und verschiedene Anfangsauslenkungen und Λ : a) $\Lambda = 0.1$, b) $\Lambda = 0.5$, c) $\Lambda = 1$, d) $\Lambda = 10$. Die blaue Linie stellt einen angefitteten Gauß dar. Für den Fall $\Lambda = 10$ ist bereits die Unregelmäßigkeit zu erkennen, die auf die Bifurkation im Phasenraum zurückzuführen ist.

n , also der Elemente $A_{n,n-k}$ (mit $k = 1, 3, 5, \dots$), ist in Abbildung 5.4 dargestellt. Diese zeigt die numerisch exakten $A_{n,n+1}$, die mit einem Gauß angefügt wurden, für verschiedene Werte von Λ zwischen 0.1 und 10 auf einer willkürlichen Skala. Es fällt ins Auge, dass die Nebendiagonale nahezu gaußförmig besetzt ist. Auch diese Regelmäßigkeit geht verloren, sobald die Anfangsbedingung in den "Self-Trapping"-Bereich hineinragt (5.4d)). In dem hier zu untersuchenden Bereich der Plasmaoszillationen sind hauptsächlich die energetisch niedrig gelegenen Zustände besetzt, womit die Gaußförmigkeit der ungeraden Nebendiagonalen gegeben ist (siehe Abbildung 5.4). Diese rührt von der n -Abhängigkeit des Überlapps $b_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle$ her, die in den Abschnitten 5.2.1 und 5.2.2 noch zu diskutieren bleibt.

Die starke gaußähnliche Abhängigkeit der Koeffizienten b_n von n beherrscht offensichtlich die n -Abhängigkeit der besetzten Nebendiagonalen, so dass für die n -Abhängigkeit von A_{nm} die Aussage getroffen werden kann

$$A_{n,n-k} \approx b_n b_{n-k}^* d_k, \quad (5.11)$$

mit den n -unabhängigen Parametern d_k , die hier als Maximum der Größe $\langle \phi_{n-k} | \hat{j} | \phi_n \rangle$ in n angesetzt werden. Für diese gilt nach (5.10)

$$|d_1| \gg |d_3| \gg |d_5| \gg \dots \quad (5.12)$$

Zur Veranschaulichung zeigt die Abbildung 5.5 das Verhältnis d_3/d_1 in Abhängigkeit von Λ für verschiedene Anfangsauslenkungen j_0 . Deutlich wird der sehr kleine Wert (< 0.1), den d_3/d_1 für alle dargestellten Parameter, insbesondere jedoch für sehr kleine Λ annimmt. Zudem steigt nach der Abbildung das Verhältnis der d_k proportional zu wachsendem Λ . Auch dieses Phänomen findet seine Erklärung in der Tatsache, dass für kleine Werte von Λ das System einem harmonischen Oszillator gleicht: Der Beitrag der höheren Nebendiagonalen in A_{nm} ist somit verschwindend klein. Dass der Betrag von d_3/d_1 ebenfalls mit der Anfangsauslenkung j_0 wächst, ist wiederum der harmonischen Oszillator-Ähnlichkeit geschuldet. Zusammenfassend kann über die Struktur der Matrix A_{nm} gesagt werden:

1. Es gibt keine Einträge auf der Diagonalen und den geraden Nebendiagonalen aufgrund der Symmetrie der Eigenzustände.
2. Je kleiner Λ und j_0 , desto weniger ungerade Nebendiagonalen sind nennenswert besetzt, da das System mehr und mehr einem harmonischen Oszillator gleicht.
3. Die gaußsche Form der besetzten Nebendiagonalen ist durch die Form der Koeffizienten b_n (5.19) festgelegt.

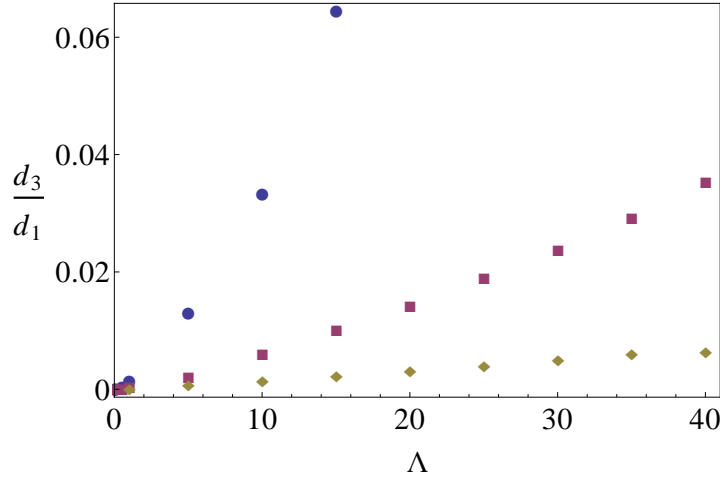


Abbildung 5.5: Numerisch bestimmtes Verhältnis d_3/d_1 in Abhängigkeit von Λ für $N = 100$ und $T = 10$ für verschiedene Anfangsauslenkungen j_0 . Die Rauten stehen für $j_0 = 5$, die Quadrate für $j_0 = 10$ und die Kreise für $j_0 = 20$.

5.2.1 Der Anfangszustand

Zur analytischen Bestimmung der Koeffizienten $b_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle$ gilt es im ersten Schritt, den Anfangszustand ψ_0 zu identifizieren und zu untersuchen. Dieser ist in der vorliegenden Arbeit stets der Grundzustand des gekippten Systems, dessen Hamiltonfunktion

$$H(j, \varphi) = \text{konst} + 2Uj^2 - 2T\sqrt{\left(\frac{(N+1)}{2}\right)^2 - j^2} \cos \varphi + 2\delta j \quad (5.13)$$

um ihr Minimum j_0 und $\varphi = 0$ harmonisch approximiert wird. Es ergibt sich

$$\begin{aligned} H_{ha}(j, \varphi) \approx & \text{konst} + \left(2\delta - \frac{2Tj_0^3}{((N+1)^2/4 - j_0^2)^{3/2}} \right) j \\ & + \left(2U + \frac{T}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j_0^2}} + \frac{Tj_0^2}{((N+1)^2/4 - j_0^2)^{3/2}} \right) j^2 \\ & + T\sqrt{(N+1)^2/4 - j_0^2} \varphi^2 + O(j^3, \varphi^3). \end{aligned} \quad (5.14)$$

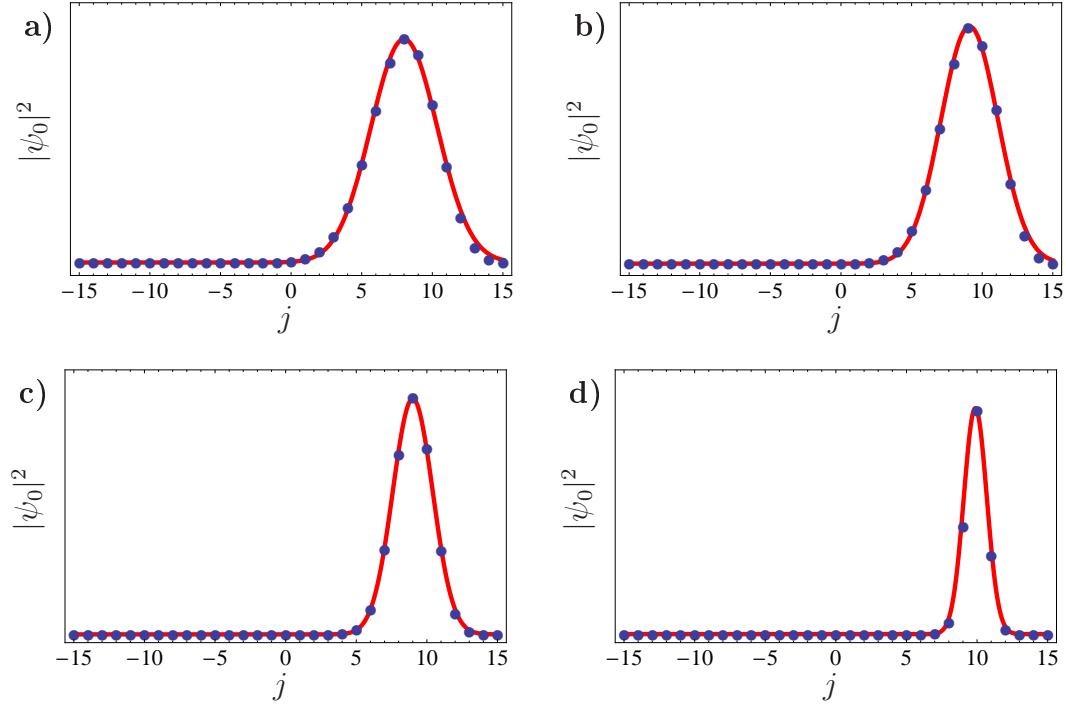


Abbildung 5.6: Gegenüberstellung des analytischen Ausdrucks des Anfangszustandes $|\psi_0|^2$ (rote durchgezogene Linie) mit dem numerisch exakten Ergebnis (blaue Punkte) für $N = 30$, $T = 3$ und verschiedene Λ : a) $\Lambda = 0.1$, b) $\Lambda = 1$, c) $\Lambda = 10$, d) $\Lambda = 100$.

Der Grundzustand eines harmonischen Oszillators hat bekanntlich die Form einer Gaußkurve [112], und für (5.14) folgt im “Impulsraum” (also in Abhängigkeit von j) der Grundzustand

$$|\psi(t=0)|^2 = |\phi_0(j)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(j - j_0)^2\right), \quad (5.15)$$

mit

$$\sigma^2 = \frac{N}{4} \frac{1 - (2j_0/N)^2}{\sqrt{\Lambda(1 - (2j_0/N)^2)^{3/2} + 1}}. \quad (5.16)$$

Der Anfangszustand ist also eine Gaußverteilung, die – je nach Stärke der Verkipfung – um j_0 aus dem Gleichgewicht ausgelenkt ist, wobei j_0 aus der Extremalbedingung $\frac{dH(j, \varphi=0)}{dj} = 0$ folgt. Der Übersicht halber wurde die Breite des Gauß mit σ abgekürzt. Je mehr die exakte Hamiltonfunktion (5.13) einem harmonischen Oszillator gleicht, also je kleiner Λ und j , desto besser sollte der Anfangszustand durch (5.15) wiedergegeben sein. In Abbildung 5.6 wurden für verschiedene Werte von Λ sowohl die analytisch bestimmten (5.15) als auch die numerisch exakten Anfangszustände dargestellt. Erkennbar beschreibt der hergeleitete Ausdruck (5.15) den Grundzustand des gekippten Systems durchgehend für alle Λ sehr gut. In

Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Diskussion in Abschnitt 4.3.1 zeigt die Abbildung zudem, dass der Grundzustand für wachsendes Λ immer stärker in der Anzahlbasis lokalisiert.

5.2.2 Reflexionsprinzip

Indem der bereits in Abschnitt 5.2.1 identifizierte Anfangszustand $\psi_0(j)$ mithilfe des vor allem aus der Molekülphysik bekannten Reflexionsprinzips [114] in den Energieraum gespiegelt wird (siehe Abbildung 5.7), lassen sich die Koeffizienten $b_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle$ näher fassen. Im Allgemeinen wird das Reflexionsprinzip zur Bestimmung von Überlappintegralen eines anfänglichen Wellenpakets $\psi_0(j)$, welches um $j \approx j_0$ lokalisiert, mit den Energieeigenfunktionen $|\phi_E\rangle$ eines Hamiltonoperators mit Potential $V(j)$ eingesetzt. Vor allem kommt es bei der direkten Photodissoziation von Molekülen zur Anwendung, wo das Absorptionsspektrum die Verteilung des Ortsraum-Wellenpakets im Grundzustand widerspiegelt. Die Reflexion erfolgt an der Tangente des Potentials $V(j)$ des angeregten Zustandes, welche am Ort des Maximums des Wellenpakets (j_0) angelegt wird. In dieser Arbeit ist die Spiegelung des Wellenpakets vom gekippten in das ungekippte System von Interesse. Im Fokus steht die Verteilung des Anfangszustands in Abhängigkeit der Energie, die an der Tangente des Potentials V^- gespiegelt wird (siehe Abbildung 5.7). Nach der Reflexion des Anfangszustands (5.15) an der Tangente

$$T(j) = \left. \frac{dV^-}{dj} \right|_{j_0} (j - j_0) = \left(4Uj_0 + \frac{2Uj_0}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j_0^2}} \right) (j - j_0)$$

ist die Verteilung in Abhängigkeit der Energie gerade

$$b(E) = \langle \psi_E | \psi_0 \rangle = c \psi_0 \left(\frac{E - V(j_0)}{V'(j_0)} \right). \quad (5.17)$$

Die Breite der Verteilung in der Energie ΔE ist hier sowohl proportional zur Breite der Verteilung in der Populationsdifferenz Δj , als auch zur Steigung des Potentials $V'(j_0)$ [114]: Je steiler die Potentialkurve, desto schmaler wird das Spektrum und umgekehrt.

Im Kontext des Reflexionsprinzips sind die Eigenfunktionen in der Energie normiert, es gilt $\langle \phi_{E_n} | \phi_{E'_m} \rangle = \delta(E_n - E'_m)$. Daher folgt für die Normierung der Eigenfunktionen $|\phi_n\rangle$

$$\langle \phi_{E_n} | \phi_{E'_m} \rangle = \delta(E_n - E'_m) = \left| \frac{\partial n}{\partial E} \right| \delta_{nm} = \left| \frac{\partial n}{\partial E} \right| \langle \phi_n | \phi_m \rangle.$$

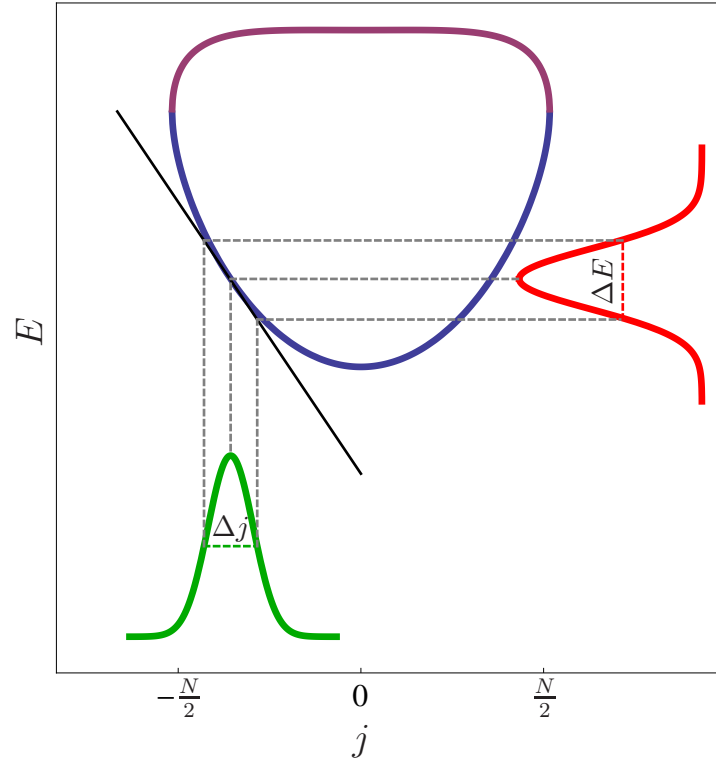


Abbildung 5.7: Schematische Darstellung des Reflexionsprinzips: Der Anfangszustand in der Anzahlbasis (grün) wird an der Tangente (schwarz) des Potentials (V^- blau, V^+ violett) in den Energieraum gespiegelt (rot).

Somit gilt für die Koeffizienten $b_n = c\sqrt{\frac{dE}{dn}}\psi_0\left(\frac{E_n - V(j_0)}{V'(j_0)}\right)$, und mit der Normierungsbedingung

$$1 = \sum_n |b_n|^2 \approx \int dn |c_n|^2$$

ergibt sich außerdem die Konstante zu $c = 1/\sqrt{V'(j_0)}$. Schließlich folgt für die Koeffizienten im Allgemeinen

$$b_n = \langle \phi_n | \psi_0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{V'(j_0)}} \sqrt{\frac{dE}{dn}} \psi_0 \left(\frac{E_n - V(j_0)}{V'(j_0)} \right). \quad (5.18)$$

Da in dieser Arbeit stets von dem Grundzustand des gekippten Systems als Anfangszustand ausgegangen wird, um möglichst nah an den relevanten Experimenten zu bleiben [68, 4, 30], ergibt sich mit (5.15)

$$b_n = \frac{1}{\sqrt[4]{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{\sqrt{V'(j_0)}} \sqrt{\frac{dE}{dn}} \exp\left(\frac{1}{4\sigma^2} \left(\frac{E_n - V(j_0)}{V'(j_0)}\right)^2\right). \quad (5.19)$$

Für die Koeffizienten b_n konnte letztlich ein Ausdruck hergeleitet werden, der ausschließlich von den systemrelevanten Parametern U , T , N und der anfänglichen Auslenkung δ bzw. j_0 abhängt. Zusammen mit den Ergebnissen (5.11) aus Abschnitt 5.2 folgt dann für die Matrix A_{nm}

$$A_{nm} = \begin{cases} d_k \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \frac{1}{V'(j_0)} \frac{dE}{dn} \exp\left(\frac{1}{4\sigma^2} \left(\frac{E_n - V(j_0)}{V'(j_0)}\right)^2\right) \exp\left(\frac{1}{4\sigma^2} \left(\frac{E_{n-k} - V(j_0)}{V'(j_0)}\right)^2\right), \\ \text{wenn } m = n \pm k \text{ mit } k = 1, 3, 5, \dots \\ 0 \text{ sonst} \end{cases}. \quad (5.20)$$

5.3 Semiklassische Dynamik der Populationsdifferenz

Nachdem nun bereits die Diagonalstruktur der Matrix A_{nm} erklärt und ein analytischer Ausdruck für deren Elemente gefunden wurde, folgt für die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz (4.12)

$$j(t) \approx \sum_{n,k} A_{n,n-k} \exp(-i(E_n - E_{n-k})t) + c.c. , \quad (5.21)$$

mit $k = 1, 3, 5, \dots$. Unter Zuhilfenahme der aus der Fourier-Analyse bekannten Poissonschen Summenformel [115] kann im Weiteren die Summe über n ersetzt werden

$$\sum_n f(n) = \sum_m \int_{-\infty}^{\infty} dn f(n) \exp(2\pi i m n) .$$

Einsetzen des Ergebnisses für $A_{n,n-k}$ (5.20) in (5.21) führt für die Dynamik der Populationsdifferenz zum Ausdruck

$$j(t) = \sum_{k=1,3,5,\dots} d_k \sum_{m=-\infty}^{\infty} I_m^k(t) + c.c. , \quad (5.22)$$

mit Summanden $I_m^k(t)$ der Form

$$I_m^k(t) = \int dn \frac{dE}{dn} \frac{1}{V'(j_0)} \psi_0 \left(\frac{E_n - V(j_0)}{V'(j_0)} \right) \psi_0^* \left(\frac{E_{n-k} - V(j_0)}{V'(j_0)} \right) e^{-i(E_n - E_{n-k})t} e^{2\pi i m n} . \quad (5.23)$$

Dieser Ausdruck wirkt auf den ersten Blick ziemlich kompliziert, lässt sich jedoch weiter vereinfachen. Statt über n bietet sich die Integration über E an. Aufgrund der starken Hierarchie der d_k (5.12) scheinen nur sehr kleine Werte von k , also $k = 1, 3$, einzugehen. Somit ist die k -Abhängigkeit im Reflexionsprinzip zu vernachlässigen, und es gilt $b_{n-k}^* \approx b_n$. Für solch kleine k kann im nächsten Schritt die Differenz der Energieeigenwerte ersetzt werden gemäß

$$E_n - E_{n-k} \approx \frac{dE}{dn} k = \frac{2\pi k}{S'(E)} .$$

Schließlich wird auf $2\pi n$ im Exponenten des Integrals (5.23) die Quantisierungsvorschrift $2\pi n = S(E) - \pi$ (5.1) angewendet mit dem Ergebnis

$$I_m^k(t) = I_m(\tau) = e^{i\pi m} \int dE \frac{1}{V'(j_0)} \left| \psi_0 \left(\frac{E - V(j_0)}{V'(j_0)} \right) \right|^2 e^{-\frac{2\pi i \tau}{S'(E)}} e^{imS(E)} \quad (5.24)$$

und $\tau = kt$. Dieser Ausdruck ist unabhängig von der Form des Energiespektrums und den Eigenschaften des Anfangszustands allgemein gültig: Er ist eines der wichtigsten Ergebnisse der vorliegenden Arbeit [31].

Im Fall eines gaußschen Anfangszustands mit besetzten Energien im Bereich der Plasmaoszillationen ($E < V^+(0)$) lässt sich das Ergebnis sogar noch weiter vereinfachen. Der analytische Ausdruck der Wirkung (5.8) kann bis zur zweiten Ordnung eingesetzt werden. Für die Ableitung der Wirkung $S'(E)$ wurde im weiteren in Abschnitt (5.1) ein analytischer Ausdruck gefunden (5.7), dessen Kehrwert hier bis zur zweiten Ordnung entwickelt wird

$$\frac{2\pi}{S'(E)} \approx \omega_p \left(1 - \frac{2UE}{\omega_p^2} \left(\frac{1 + \frac{\Lambda}{4}}{1 + \Lambda} \right) - \frac{U^2 E^2}{\omega_p^4} \left(\frac{5 + \Lambda + 5 \left(\frac{\Lambda}{4} \right)^2}{(1 + \Lambda)^2} \right) \right) .$$

Letztlich erhält man zusammen mit dem analytisch bekannten Anfangszustand (5.15) ein Integral über eine Gaußkurve, welches analytisch zu lösen ist. Nach einigen Umformungen folgt schließlich für die Dynamik der Populationsdifferenz der geschlossene Ausdruck

$$j(t) = \sum_{k=1,3,5,\dots} d_k \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2}{(1 + A^2)^{1/4}} \cos(\tilde{\omega}_p \tau - \tilde{\varphi}) \exp \left(-\frac{1}{2(1 + A^2)} \left(\frac{\tau - mT_{\text{rev}}}{T_{\text{kollaps}}} \right)^2 \right) , \quad (5.25)$$

mit den Parametern

$$A = \tau \Sigma_\tau - m \Sigma_m \quad (5.26)$$

$$\tilde{\omega}_p = \omega_p (1 - 2c_1 g - 5c_2 g^2) \quad (5.27)$$

$$T_{\text{rev}} = \frac{\pi (1 + 2c_1 g)}{U (c_1 + 5c_2 g)} \quad (5.28)$$

$$T_{\text{kollaps}} = \frac{1}{2g \Delta V_0 \omega_p (c_1 + 5c_2 g)} \quad (5.29)$$

und den Λ -abhängigen Zahlen

$$c_1 = \frac{1 + \Lambda/4}{1 + \Lambda}$$

$$c_2 = \frac{1 + \frac{\Lambda}{5} + \frac{\Lambda^2}{4^2}}{(1 + \Lambda)^2}.$$

Außerdem ist

$$g = \frac{UV(j_0)}{\omega_p^2}$$

ein dimensionsloser Wechselwirkungsparameter, und die Größe

$$\Delta V_0 = \sigma V'(j_0)/V(j_0)$$

beschreibt die Breite des Wellenpakets im Verhältnis zu der mittleren angeregten Energie. Die restlichen Parameter sind definiert wie folgt

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi} &= -m\varphi_m + \frac{1}{2} \arctan A - \frac{A \left(\frac{\tau - mT_{\text{rev}}}{T_{\text{kollaps}}} \right)^2}{2(1 + A^2)} \\ \varphi_m &= 2\pi \bar{V} (1 + c_1 g - 1/(2\bar{V})) \\ \bar{V} &= V(j_0)/\omega_p \\ A &= \tau \Sigma_\tau - m \Sigma_m \\ \Sigma_\tau &= 10c_2 (\Delta V_0)^2 g^2 \omega_p \\ \Sigma_m &= 4\pi c_1 (\Delta V_0)^2 g \bar{V}. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Für die mithilfe semiklassischer Methoden hergeleitete Gleichung (5.25) ist grundsätzlich festzuhalten, dass sie die Dynamik der Populationsdifferenz vollständig in Abhängigkeit der (wenigen) relevanten Systemparameter N , U , T und j_0 beschreibt. Alle weiteren Größen hängen ausschließlich von diesen Parametern ab.

Zur Struktur der Gleichung (5.25) lassen sich diverse Aussagen treffen: Offenbar handelt es sich um eine harmonische Schwingung der Frequenz $\tilde{\omega}_p$ moduliert mit einer Phase $\tilde{\varphi} = \tilde{\varphi}(\tau, m)$. Diese wird von einer Sequenz (Summe über m) aus durch

den Faktor $(1 + A^2)^{-1/4}$ leicht verzerrten Gaußfunktionen eingehüllt, so wie es nach Abschnitt 4.3 zu erwarten war. Für $m = 0$ ergibt sich der Zerfall des Signals mit der Kollapszeit T_{kollaps} und für $m = 1, 2, \dots$ das erste, zweite usw. Revival der Populationsdifferenz mit der Revivalzeit T_{rev} . Der Parameter A (5.30) führt zu einer langsamen Verbreiterung und Abschwächung des Signals mit m und der Zeit τ . Dieser Einfluss wird bedeutend mit wachsendem Λ . Somit finden wiederum die Ergebnisse aus Abschnitt 4.3 Bestätigung, nach denen die Revivals für wachsendes Λ an Höhe verlieren und sich verbreitern. Die Phase $\tilde{\varphi}$ ändert sich nur langsam in der Zeit und wird in der Folge ausschließlich für sehr große Zeiten τ relevant. Weiterhin berücksichtigt die Summe über k die Beiträge der höheren Nebendiagonalen ($k = 3, 5, \dots$), was zu kleineren Revivals in der Größenordnung von d_k führt. Dieser Sachverhalt wird in Abschnitt 5.4.4 im Detail betrachtet.

5.3.1 Rabi-Limes

Bevor als wesentliche Eigenschaften des analytischen Ausdrucks (5.25) sowohl die Frequenz der Plasmaoszillationen (5.27) als auch die Kollaps- bzw. Revivalzeit (5.29) und (5.28) vorgestellt werden, soll auf den Grenzfall sehr kleiner Λ eingegangen werden. In diesem Rabi-Limes $\Lambda \rightarrow 0$ ist nämlich das Integral (5.3) ohne weitere Approximationen analytisch zu lösen. Für das Spektrum ergibt sich die simple Formel

$$E_{\text{Rabi}}(n) = \omega_p n - U n^2 ,$$

und nach einigen Rechnungen folgt für die Dynamik der Populationsdifferenz der Ausdruck

$$j_{\text{Rabi}}(t) \approx j_0 \sum_m \cos(\omega_p(1 - 2g)t + 2\pi V(j_0)/\omega_p m) \exp\left(-2\omega_p^2 g^2 (\Delta V_0)^2 \left(t - \frac{\pi m}{U}\right)^2\right) . \quad (5.31)$$

Dieses Ergebnis ist mit einer adäquaten Identifikation der Parameter in der Literatur [94] zu finden, und es lässt sich einfach zeigen, dass diese Formel tatsächlich aus der komplexeren und mächtigeren Formel (5.25) für den Grenzfall $\Lambda \rightarrow 0$ folgt, was in den Abschnitten 5.4.2 und 5.4.3 im Detail diskutiert wird.

5.4 Ergebnisse: Vergleich numerisch exakt vs. Semiklassik und Rabi-Limes

Die im vorangegangenen Abschnitt hergeleiteten analytischen Ausdrücke beschreiben die Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential vollständig. Inwieweit die Erwartung zutrifft, dass die Formel (5.25) für beliebige Werte von Λ gilt, soll im Folgenden untersucht werden. Dazu erfolgt eine Gegenüberstellung der Ergebnisse (für allgemeines Λ und im Rabi-Limes) und der numerisch exakten Resultate. Die Abbildungen 5.8 bis 5.11 zeigen solch einen Vergleich für verschiedene Werte von Λ zwischen 0.1 und 25.

Nach den Graphen beschreibt der semiklassisch gewonnene analytische Ausdruck (5.25) die Numerik für alle Werte von Λ tatsächlich nahezu exakt. Im Gegensatz dazu ist die einfachere Formel (5.31) offensichtlich nur für sehr kleine Werte von Λ gültig (Abbildung 5.8 mit $\Lambda = 0.1$), was genau den zugrunde gelegten Annahmen entspricht. Mit wachsendem Λ weicht die Näherung im Rabi-Limes immer stärker von sowohl der exakten als auch der semiklassischen Formel ab, wie aus den Abbildungen 5.9 bis 5.11 hervorgeht.

Diese hohe Übereinstimmung der Semiklassik mit den exakten Resultaten ist ein erstaunliches und wichtiges Ergebnis im Hinblick auf den zugrunde gelegten breiten Wertebereich von Λ . Im Weiteren sind noch die die Dynamik dominierenden Größen $\tilde{\omega}_p$, T_{rev} und T_{kollaps} und deren Abhängigkeit von den relevanten Systemparametern zu diskutieren.

5.4.1 Oszillationsfrequenz

Für beliebige Werte von Λ ergibt sich die Frequenz der Plasmaoszillationen als

$$\tilde{\omega}_p = \omega_p(1 - 2c_1g - 5c_2g^2) .$$

Im Unterschied zur klassischen Plasmafrequenz ω_p ist sie gültig für beliebige Werte von Λ und das sowohl im Rabi- als auch im Josephson-Regime. Für $\Lambda \rightarrow 0$ im Rabi-Regime ergibt sich schlicht die bekannte Plasmafrequenz ω_p , da die Konstanten c_1 und c_2 offensichtlich gleich eins werden, und der Parameter g in diesem Limes gegen null geht. Leicht erkennbar ist dieser Sachverhalt nach der Abschätzung der Konstanten g

$$g \approx \frac{1}{8} \left(\frac{2j_0}{N} \right)^2 \Lambda . \quad (5.32)$$

Die Abschätzung (5.32) folgt aus der harmonischen Approximation des Potentials $V(j_0)$, was für kleine j_0 adäquat sein sollte. Der Ausdruck demonstriert, dass g für

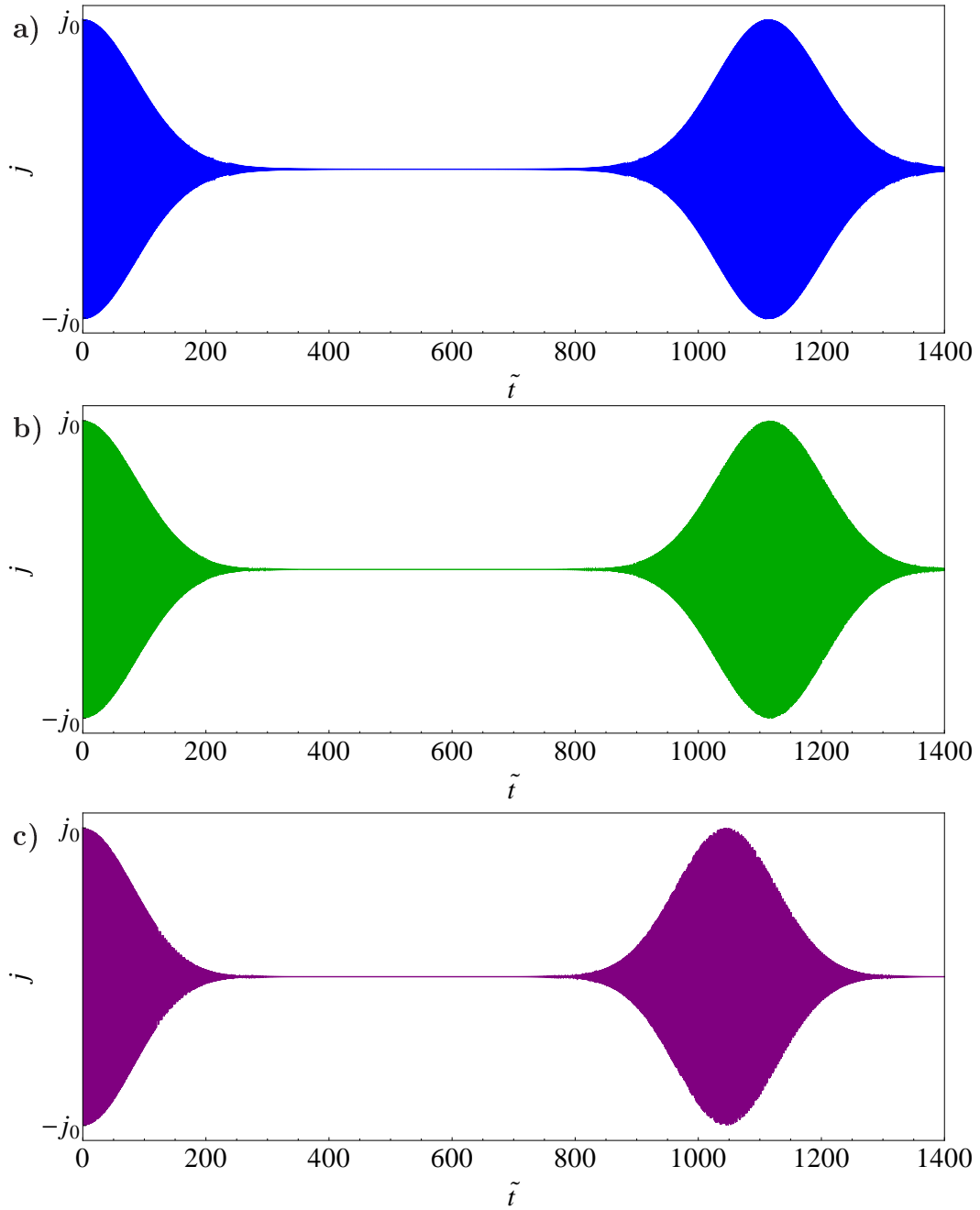


Abbildung 5.8: Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential
a) numerisch exaktes Ergebnis
b) semiklassischer Ausdruck (5.25) und
c) analytischer Ausdruck im Rabi-Limes (5.31)
jeweils in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_0 t}{2\pi}$ für $\Lambda = 0.1$,
 $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 20$.

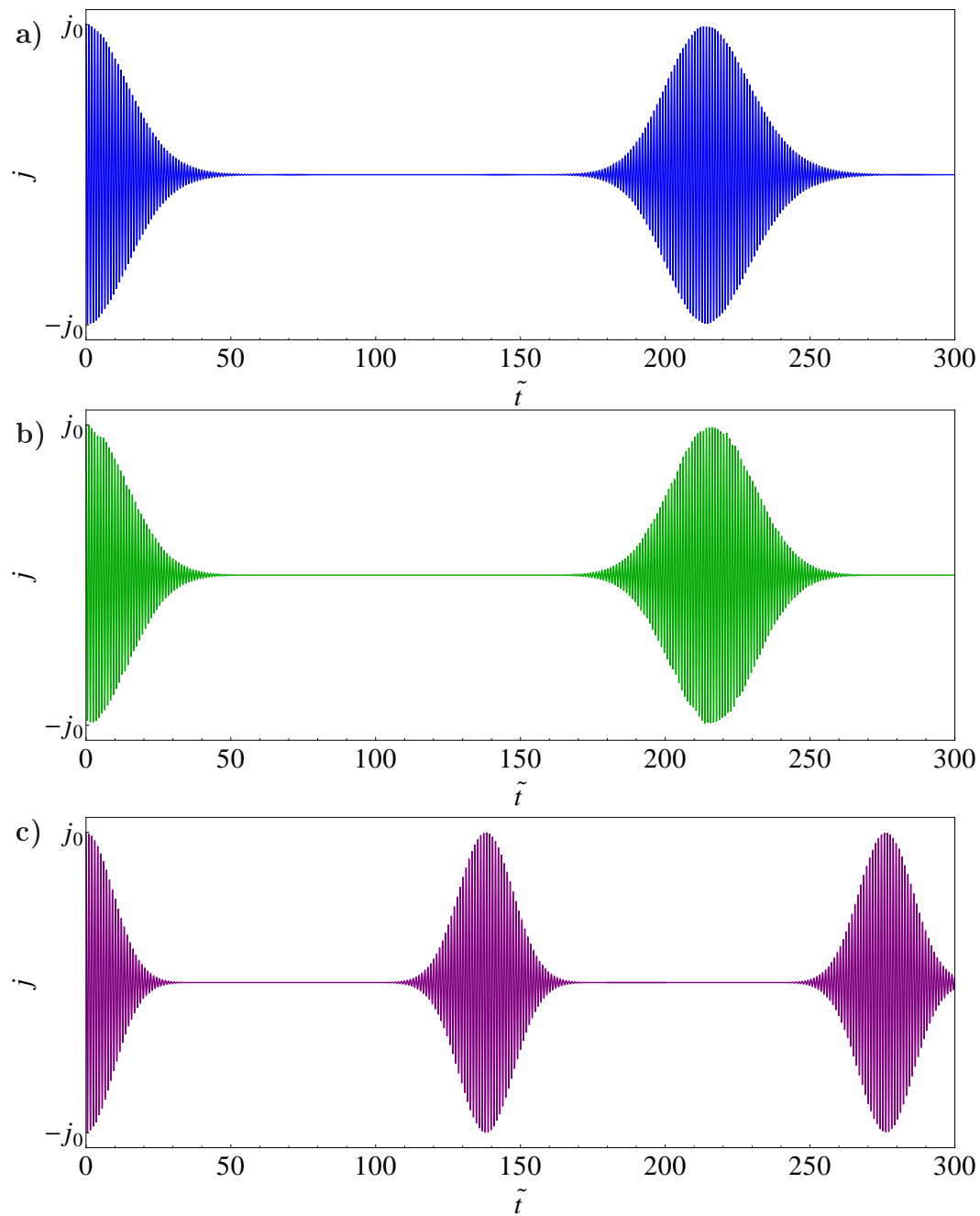


Abbildung 5.9: Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential

a) numerisch exaktes Ergebnis

b) semiklassischer Ausdruck (5.25) und

c) analytischer Ausdruck im Rabi-Limes (5.31)

jeweils in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $\Lambda = 1$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 20$.

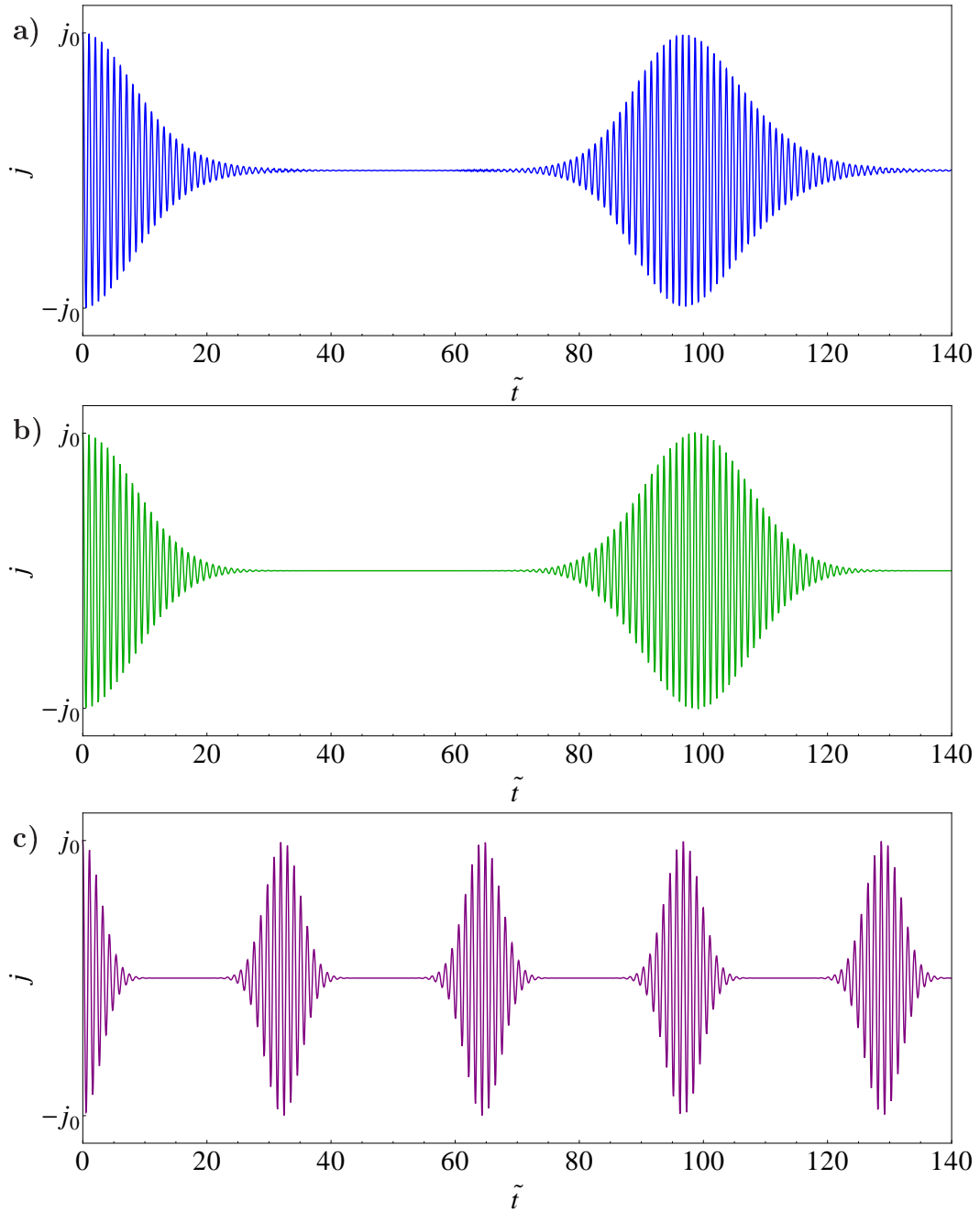


Abbildung 5.10: Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential

a) numerisch exaktes Ergebnis

b) semiklassischer Ausdruck (5.25) und

c) analytischer Ausdruck im Rabi-Limes (5.31)

jeweils in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $\Lambda = 10$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 10$.

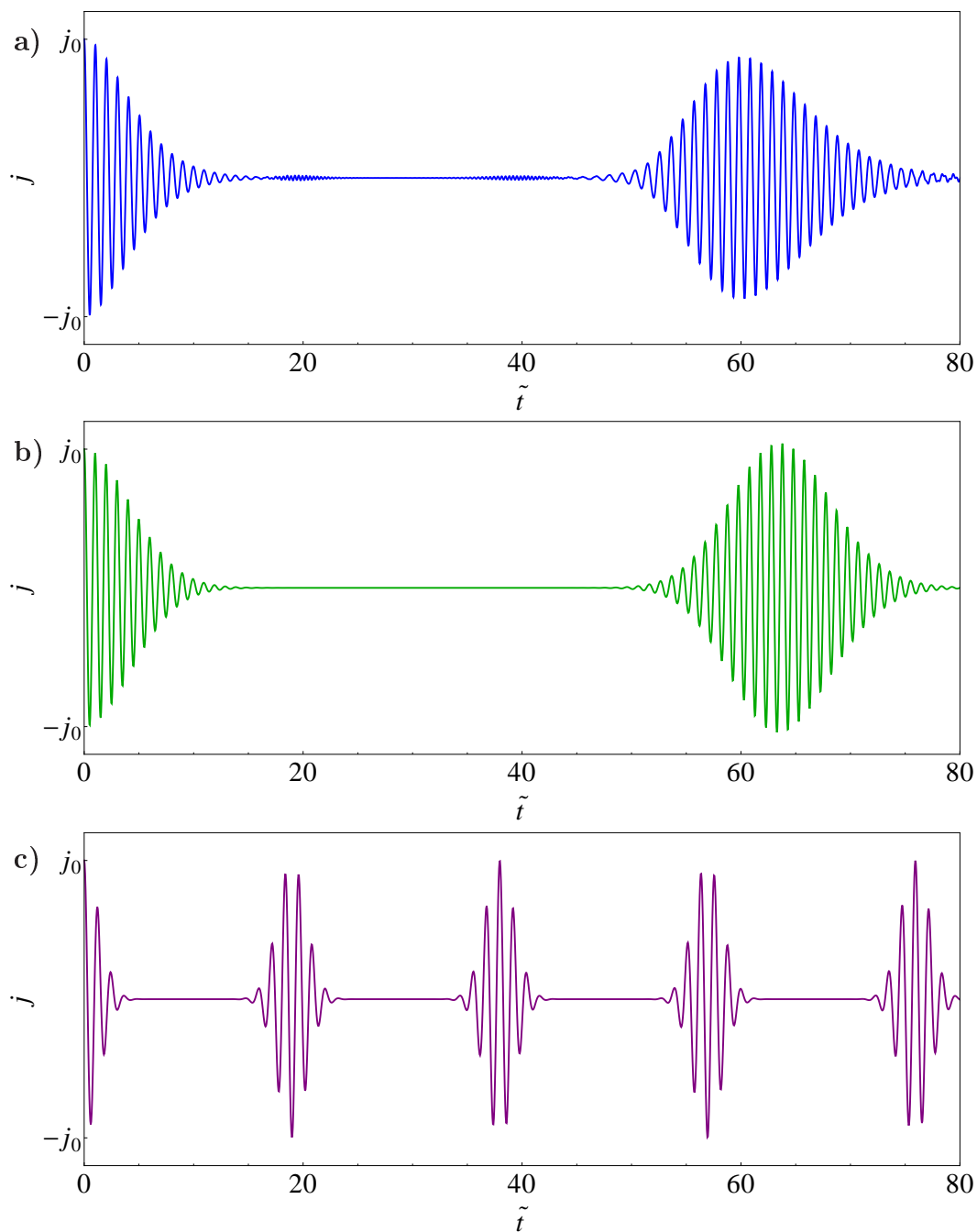


Abbildung 5.11: Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential

a) numerisch exaktes Ergebnis

b) semiklassischer Ausdruck (5.25) und

c) analytischer Ausdruck im Rabi-Limes (5.31)

jeweils in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $\Lambda = 25$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 10$.

festen anfänglichen Auslenkung j_0 proportional zu Λ ist. Somit wird g gleich null für $\Lambda \rightarrow 0$ und groß für wachsendes Λ . In letzterem Fall nimmt die Bedeutung des Korrekturterms in der semiklassischen Plasmafrequenz $\tilde{\omega}_p$ stetig zu und lässt die echte Frequenz der Oszillationen immer deutlicher von ω_p abweichen. Die Abbildungen 5.8 bis 5.11 illustrieren ebendiesen Zusammenhang, dass für wachsendes Λ die Näherung für den Rabi-Grenzfall (5.31) keine sinnvollen Aussagen über die tatsächliche Oszillationsfrequenz mehr trifft, wohingegen $\tilde{\omega}_p$ (4.15) weiterhin ein nahezu exaktes Ergebnis liefert.

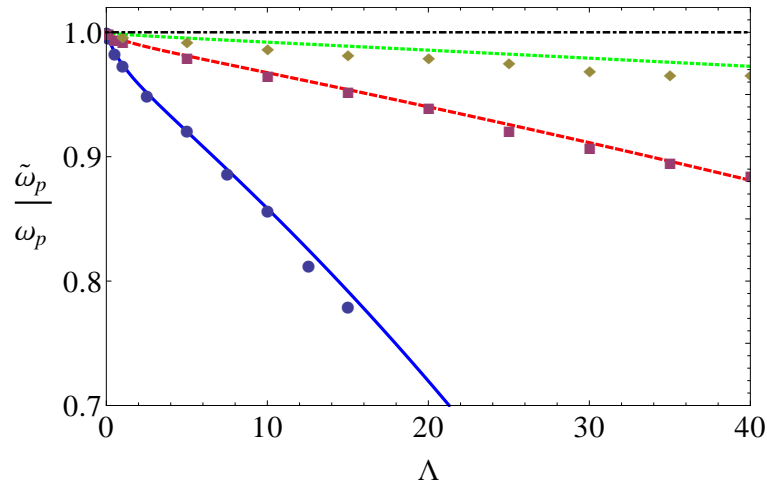


Abbildung 5.12: Gegenüberstellung numerisch exakter (Symbole) / semiklassischer Plasmafrequenz $\tilde{\omega}_p$ (Linien) in Abhängigkeit von Λ für verschiedene anfängliche Auslenkungen j_0 :
 Rauten / grüne gepunktete Linie: $j_0 = 5$,
 Quadrate / rote gestrichelte Linie: $j_0 = 10$,
 Kreise / blaue durchgezogene Linie: $j_0 = 20$.
 Die schwarze gestrichpunktete Linie stellt die einfache, aus der Literatur bekannte Plasmafrequenz $\omega_p = 2T\sqrt{1 + \Lambda}$ dar.

Dieser Sachverhalt geht sogar noch deutlicher aus Abbildung 5.12 hervor: Sie zeigt die numerisch exakte Plasmafrequenz im Vergleich zur semiklassischen (5.27) und zur aus der Literatur bekannten Plasmafrequenz ω_p , die dem Rabi-Grenzfall entspricht, in Abhängigkeit von Λ für verschiedene Anfangsauslenkungen j_0 . Nun wird ersichtlich, dass der in der vorliegenden Arbeit hergeleitete Ausdruck (5.27) für alle Werte von j_0 extrem genau mit den numerisch gewonnenen Ergebnissen übereinstimmt. Nach der Abbildung hängt weiterhin die Diskrepanz zwischen der tatsächlichen Frequenz und der einfachen Plasmafrequenz ω_p von der Auslenkung j_0 ab: Je größer die anfängliche Auslenkung, desto ungenauer ist ω_p . Letztlich ist dieser Zusammenhang leicht zu erklären, folgt ω_p doch aus der Entwicklung der klassischen Bewegungsgleichungen für kleine j und φ . Erkennbar wird dies zudem

an der Gleichung (5.27). Der Korrekturterm wächst nicht nur mit Λ , sondern ebenfalls quadratisch mit j_0 , was wiederum aus der Gleichung (5.32) hervorgeht.

Im Ergebnis bleibt festzuhalten, dass besonders für große Werte von Λ und j_0 die Abweichungen der tatsächlichen Oszillationsfrequenz $\tilde{\omega}_p$ und der in der Literatur angenommenen ω_p signifikant werden. Nachdem sich Λ in den relevanten Experimenten [68, 4, 30] zwischen 10 und 25 bewegt, wird der hier hergeleitete Korrekturterm durchaus interessant. In [68] werden experimentelle Ergebnisse für $N \approx 1000$, $\Lambda = 25$ und $j_0/N \approx 0.15$ vorgestellt. Einsetzen dieser Parameter in die semiklassische Gleichung für die Plasmafrequenz (5.27) führt zu einer Periodendauer $T_{\tilde{p}} = 2\pi/\tilde{\omega}_p \approx 39\text{ms}$, was ziemlich genau der im Experiment gemessenen $\approx 40\text{ms}$ entspricht. Würde man auf die hier hergeleiteten Korrekturterme verzichten und nur die klassische Plasmafrequenz ω_p hinzuziehen, so würde sich mit $T_p = 2\pi/\omega_p \approx 30\text{ms}$ eine durchaus signifikante Abweichung ergeben.

5.4.2 Kollapszeit

Die semiklassisch hergeleitete Kollapszeit ist

$$T_{\text{kollaps}} = \frac{1}{2g\Delta V_0\omega_p(c_1 + 5c_2g)} .$$

Der Ausdruck vor der Klammer ist identisch mit dem für den Rabi-Grenzfall in Formel (5.31)

$$T_{\text{kollaps,Rabi}} = \frac{1}{2g\Delta V_0\omega_p} . \quad (5.33)$$

Somit stellt der Teil in der Klammer einen Korrekturterm für $\Lambda \neq 0$ dar (da $c_1, c_2 \rightarrow 1$ und $g \rightarrow 0$ für $\Lambda \rightarrow 0$). Andererseits kann der Ausdruck vor der Klammer auch geschrieben werden als

$$2g\Delta V_0\omega_p \approx \frac{\Lambda\omega_p\sigma\left(\frac{2j_0}{N}\right)}{N} . \quad (5.34)$$

Gemäß Gleichung (5.16) ist σ proportional zu \sqrt{N} für festes Λ und $2j_0/N$. In diesem Fall ist auch die Kollapszeit proportional zu \sqrt{N} , was bereits in [111, 116] festgestellt wurde. Die semiklassischen Ausdrücke für σ und T_{kollaps} zeigen allerdings ebenfalls, dass dieser Zusammenhang nur für den vorausgesetzten Spezialfall (festes Λ und $2j_0/N$) und den Rabi-Grenzfall gilt, weil ansonsten der Korrekturterm in der Klammer bedeutend beiträgt. In diesem Fall hängt die Kollapszeit in nicht-trivialer Weise von Λ und j_0 ab, wie die Formeln (5.16), (5.34) und (5.29) zeigen und es in den Abbildungen 5.8 bis 5.11 deutlich wird. Für wachsendes Λ ist $T_{\text{kollaps,Rabi}}$ offensichtlich nicht mehr ausreichend, die tatsächliche Kollapszeit zu reproduzieren. Wie aus Abbildung 5.13 hervorgeht, scheint der detaillierte semi-

klassische Ausdruck der Kollapszeit (5.29) sogar für relativ große Λ sehr genau zu sein. Die Abbildung stellt die Dynamik der Populationsdifferenz auf der Zeitskala des ersten Kollapses für verschiedene Werte von Λ dar. Für kleine Λ ist in den Abbildungen 5.13a) und 5.13b) auch der Rabi-Limes aufgetragen, für große Λ nur noch die exakte und detaillierte semiklassische Dynamik (siehe 5.13c) und 5.13d)). Sogar bei dem aus experimenteller Sicht interessanten Fall für $\Lambda = 25$ fällt ins Auge, dass die Semiklassik den Kollaps nahezu exakt wiedergibt.

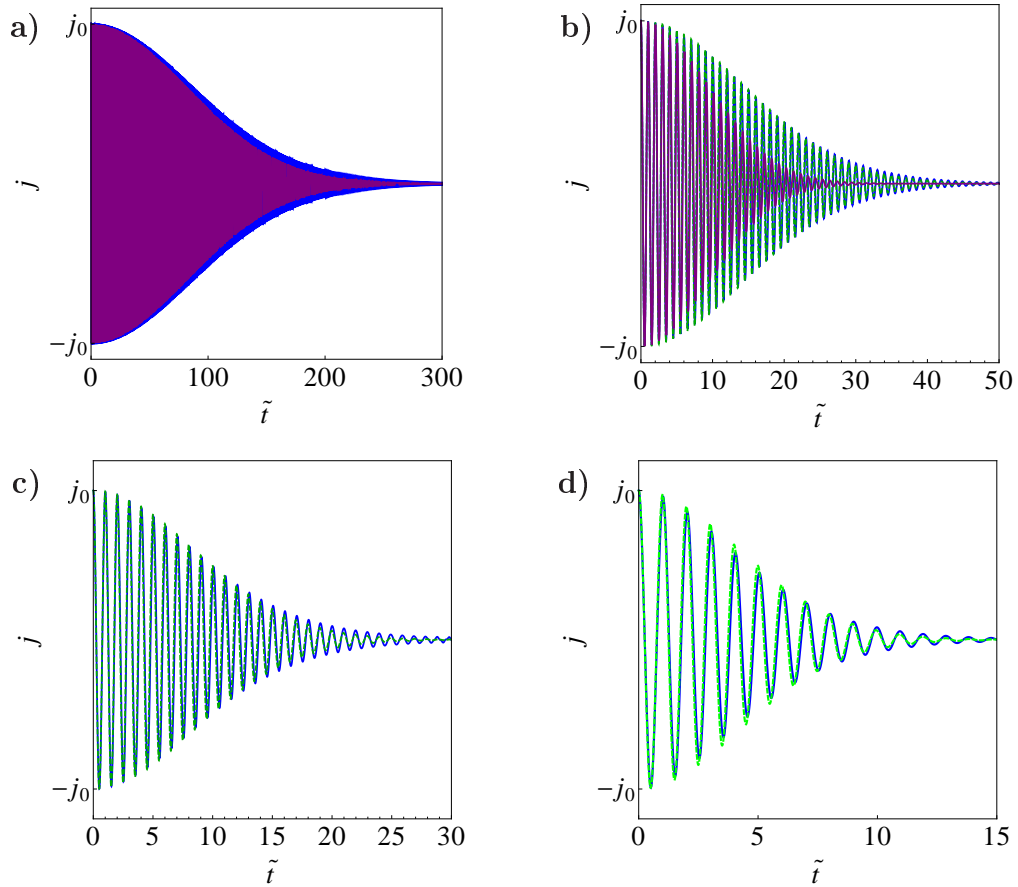


Abbildung 5.13: Vergleich des numerisch exakten Ergebnisses (blau) der Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential mit dem semiklassischen Ausdruck (5.25) (grün) und dem analytischen Ausdruck im Rabi-Limes (5.31) (violett) in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $N = 100$, $T = 10$ und
a) $\Lambda = 0.1$ und $j_0 = 20$, b) $\Lambda = 1$ und $j_0 = 20$,
c) $\Lambda = 10$ und $j_0 = 10$, d) $\Lambda = 25$ und $j_0 = 10$.

5.4.3 Revivalzeit

Schließlich folgt aus den semiklassischen Näherungen für die Revivalzeit

$$T_{\text{rev}} = \frac{\pi (1 + 2c_1g)}{U (c_1 + 5c_2g)} ,$$

und für den Rabi-Limes (5.31)

$$T_{\text{rev,Rabi}} = \frac{\pi}{U} . \quad (5.35)$$

Interessanterweise wird die Revivalzeit im Grenzfall $\Lambda \rightarrow 0$ offensichtlich unabhängig von allen relevanten Systemparametern ausgenommen der Wechselwirkungsstärke U . Das Verhalten der Revivalzeit wurde bereits in der Literatur diskutiert [93] mit dem Ergebnis $T_{\text{rev}} = 4\pi$ für $U = \frac{1}{4}$ (man beachte die abweichende Definition der Parameter), was für den Rabi-Limes von (5.28) und (5.35) Bestätigung findet. In diesem Grenzfall gehen die Konstanten c_1 und c_2 gegen eins und g gegen null, so dass der Korrekturterm in (5.28) identisch eins wird. Andererseits wird in [93] abgeleitet, dass für festes Λ die Revivalzeit linear mit der Anzahl der Teilchen N wächst. Diese Aussage ist zwar nicht falsch, aber doch irreführend. Nach dem semiklassisch hergeleiteten Ausdruck für die Kollapszeit ist die Kollapszeit im Rabi-Limes ausschließlich umgekehrt proportional zu U . Wird $\Lambda = UN/T$ festgehalten, ergibt sich die in [93] beobachtete N -Abhängigkeit. Zwar wird in [111] ebenfalls ein analytischer Ausdruck für die Revivalzeit hergeleitet, dies allerdings lediglich für den sehr speziellen Fall $\Lambda = 1$ und für negative Streulängen a . Auch in diesem Artikel wird eine Proportionalität der Revivalzeit zu N geschlussfolgert. All diese Ergebnisse tragen nicht zum tieferen Verständnis der inneren Zusammenhänge bei.

Auf Basis der hier erarbeiteten semiklassischen Ausdrücke lassen sich hingegen klärende Aussagen treffen. Ähnlich wie bei den anderen bereits diskutierten Größen wächst in der Revivalzeit der Korrekturterm zum Rabi-Limes mit Λ . Die Revivalzeit ist somit nicht mehr mit π/U anzunähern, wie es den Abbildungen 5.14, 5.10 und 5.11 zu entnehmen ist. Abbildung 5.14 zeigt die Gegenüberstellung der numerisch exakt bestimmten mit den semiklassisch genäherten Revivalzeiten und dem Ergebnis im Grenzfall $\Lambda \rightarrow 0$. Offensichtlich stimmen die numerischen Revivalzeiten bereits für verhältnismäßig kleine $\Lambda = 2$ mit $T_{\text{rev,Rabi}} = \frac{\pi}{U}$ nicht mehr überein. Andererseits beschreibt die semiklassische Näherung (5.28) die tatsächliche Revivalzeit für die eher kleinen anfänglichen Auslenkungen $j_0 = 5$ bzw. $j_0 = 10$ sehr genau. Für größeres $j_0 = 20$ und wachsendes Λ weicht die semiklassische Näherung stärker vom exakten Ergebnis ab. Die Begründung ist in der stetig wachsenden Anzahl von Doublets zu finden, die das Energiespektrum des Systems für größer werdendes Λ aufweist (in Kapitel 4.3 diskutiert und in Abbildung 5.1 dargestellt). Für solch große j_0 ragen die anfänglichen Wellenpakete immer weiter in den “Self-Trapping”-Bereich hinein. In der Folge wird die Struktur der Dynamik

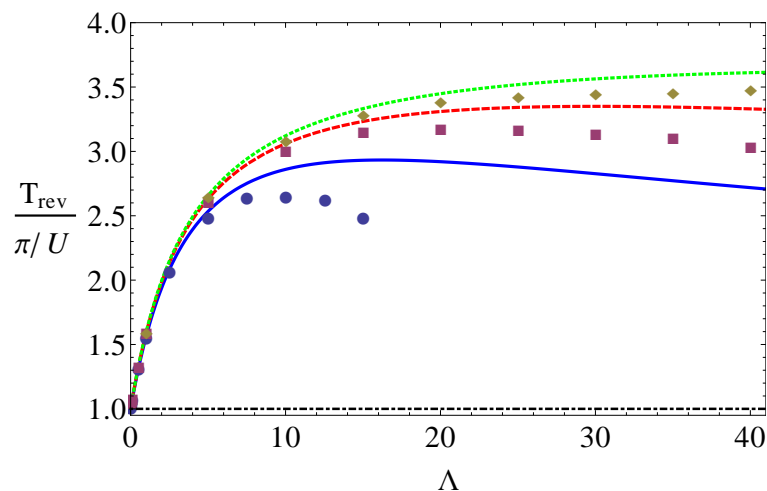


Abbildung 5.14: Gegenüberstellung numerisch exakter (Symbole) / semiklassischer Revivalzeiten (5.28) (Linien) in Abhängigkeit von Λ für unterschiedliche anfängliche Auslenkungen j_0 :

Rauten / grüne gepunktete Linie: $j_0 = 5$,

Quadrate / rote gestrichelte Linie: $j_0 = 10$,

Kreise / blaue durchgezogene Linie: $j_0 = 20$.

Die schwarze gestrichelpunktete Linie stellt den Rabi-Limes mit $T_{\text{rev,Rabi}} = \frac{\pi}{U}$ dar.

der Populationsdifferenz unregelmäßiger (siehe Abschnitt 4.3.1), bis der komplette Übergang in den “Self-Trapping”-Bereich stattfindet. Wie in diesem Kapitel bereits festgestellt, sind die semiklassischen Entwicklungen nur für einen Energiebereich $E < V^+(0)$ gültig, so dass gerade über die Dynamik im Übergang zum (und im) STR keine sinnvollen Aussagen zu machen sind. Dies erklärt die starke Abweichung der semiklassischen Näherung von den exakten Ergebnissen in der Abbildung 5.14 für großes j_0 .

5.4.4 Einfluss der höheren Nebendiagonalen

Bisher wurde nicht näher auf die Summe über k im semiklassischen Ausdruck der Dynamik der Populationsdifferenz (5.25) eingegangen. Aufgrund der starken Hierarchie der Konstanten d_k (5.12) wurde diese Summe über k vernachlässigt und nur der Beitrag $k = 1$ berücksichtigt, der offensichtlich den Hauptbeitrag zur Dynamik der Populationsdifferenz liefert (siehe Abbildungen 5.8 bis 5.11). Für

die Konstante wurde $d_1 = j_0/2$ angenommen. Zur Rechtfertigung ist $j(t = 0)$ zu betrachten. Mithilfe der Gleichungen (5.22) und (5.24) folgt

$$j_0 = j(t = 0) = \sum_k d_k \frac{1}{V'(j_0)} \int dE \left| \psi_0 \left(\frac{E - V(j_0)}{V'(j_0)} \right) \right|^2 + c.c. = 2 \sum_k d_k .$$

Somit ergibt sich gerade die Annahme $d_1 = j_0/2$, beachtet man nur den $k = 1$ -sten Beitrag. Obwohl die Haupteigenschaften der Dynamik unter dieser Annahme sowohl qualitativ als auch quantitativ reproduziert werden können, ist es besonders für größere Werte von Λ und j_0 interessant, den Einfluss des Beitrages für $k = 3$ zu untersuchen. Die Beträge der höheren Summanden $d_k = 5, 7, \dots$ hingegen scheinen so klein zu sein, dass sie vollständig vernachlässigt werden können.

Obwohl die exakten Beträge der Konstanten $d_{1/3}$ in analytischer Form nicht bekannt sind, lassen sich aufgrund der Tatsache, dass $2(d_1 + d_3) = j_0$ und der starken Hierarchie der d_k qualitative Aussagen über den Einfluss der dritten Nebendiagonale machen. Von den verschiedenen Beträgen der d_k abgesehen, besteht der einzige Unterschied zwischen den Beiträgen erster und dritter Ordnung in der Dynamik (5.25) in der Zeitskala, die hier mit $\tau = kt$ eine andere ist. Für $k = 3$ findet die Dynamik offensichtlich auf einer Zeitskala statt, die um ein Drittel kleiner ist als die der Hauptmerkmale der Dynamik der Populationsdifferenz. Weiterhin sollte die Höhe der Revivals deutlich kleiner sein als die der primären Dynamik, da $|d_1| \gg |d_3|$. Diese Beobachtungen führen exakt zu dem Phänomen der sehr kleinen Revivals der numerisch exakten Dynamik, die in Abschnitt (4.3.1) für wachsendes Λ beobachtet wurden (siehe Abbildung 4.12).

Um auch einen quantitativen Vergleich vornehmen zu können, wurde die Höhe der Drittel-Revivals d_3 für den Fall $\Lambda = 1$, $N = 100$ und $T = 10$ aus den numerisch exakten Daten abgelesen. Die Abbildung 5.15 zeigt dazu die numerisch exakten Ergebnisse im Kontrast zur semiklassischen Formel für die Dynamik der Populationsdifferenz (5.25). Deutlich beschreibt das semiklassisch hergeleitete Ergebnis (5.25) auch für die kleinen Drittel-Revivals die exakte Dynamik extrem gut, und die dazugehörige Zeitskala entspricht mit hoher Genauigkeit einem Drittel der Zeitskala der primären Dynamik. Noch klarer geht dies aus Abbildung 5.16 hervor, die das erste Drittel-Revival etwas detaillierter darstellt. Offensichtlich oszilliert die Populationsdifferenz genau drei Mal in dem markierten Bereich einer primären Umlaufzeit $T = 2\pi/\tilde{\omega}_p$. Der analytische semiklassische Ausdruck (5.25) für die Dynamik der Populationsdifferenz kann also sogar qualitativ mit hoher Präzision das Phänomen der kleinen Drittel-Revivals, deren Oszillationsfrequenz, Revivalzeit und Kollapszeit beschreiben. Nachdem die Beiträge der höheren Nebendiagonalen $k = 3$ zu dem Auftreten der Drittel-Revivals führen, erklärt sich auch die Tatsache, dass diese nur für große Λ zu beobachten sind. Für kleine Λ ist das System einem harmonischen Oszillator ähnlich mit praktisch nicht besetzten höheren Nebendiagonalen.

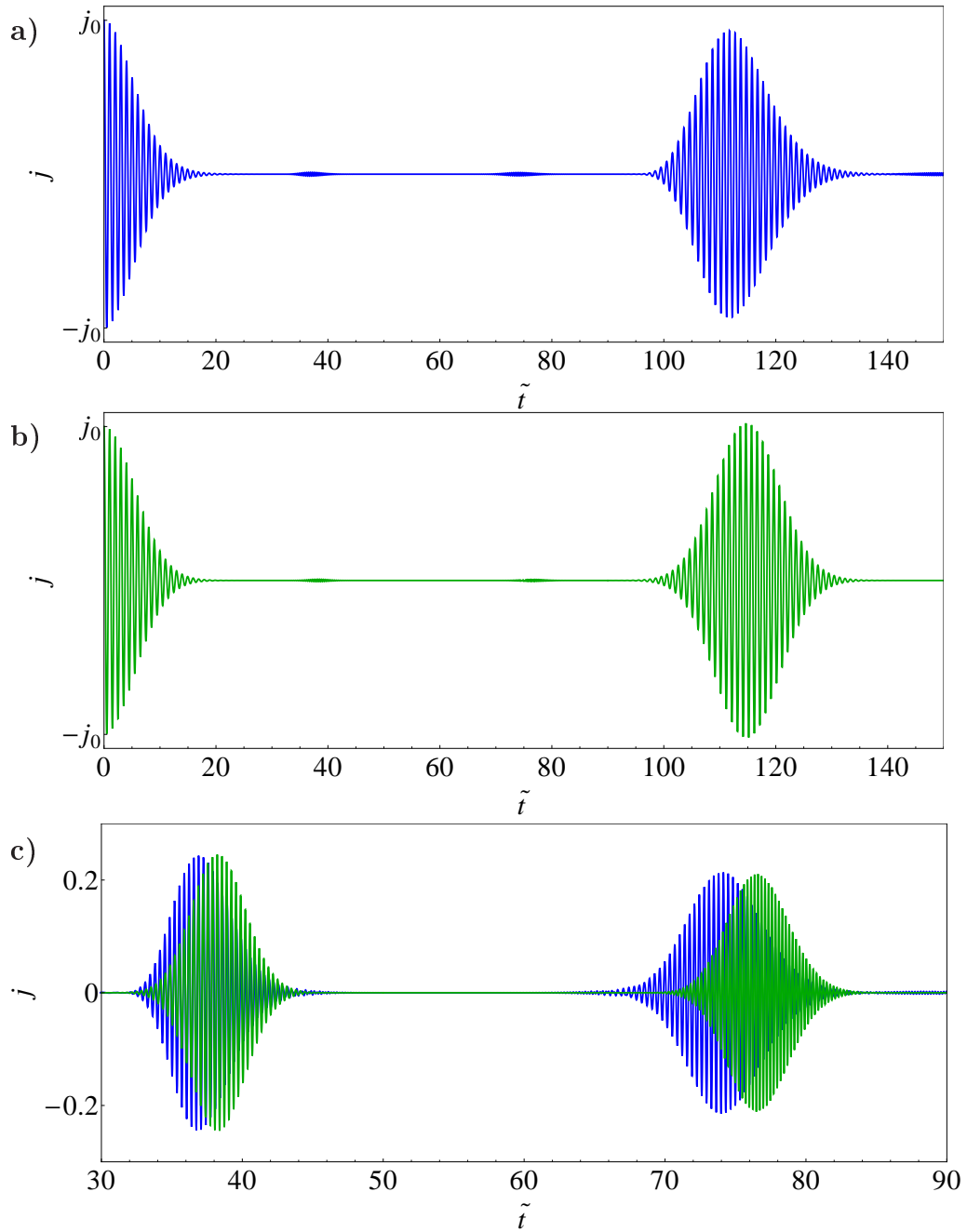


Abbildung 5.15: Zeitentwicklung der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential
 a) numerisch exaktes Ergebnis und
 b) semiklassischer Ausdruck (5.25)
 jeweils in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $\Lambda = 5$,
 $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 20$. Die Graphik c) zeigt einen kleineren
 Ausschnitt in j des numerisch exakten Ergebnisses (grün) und der semiklassischen
 Dynamik (blau), um die kleinen Drittel-Revivals sichtbar zu machen.

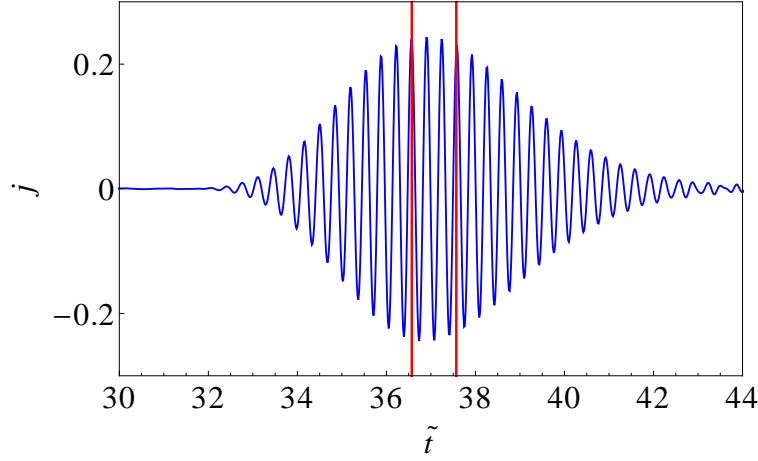


Abbildung 5.16: Numerische Dynamik der Populationsdifferenz j im Doppelmuldenpotential in Abhängigkeit der dimensionslosen Zeit $\tilde{t} = \frac{\tilde{\omega}_p t}{2\pi}$ für $\Lambda = 1$, $N = 100$, $T = 10$ und $j_0 = 35$. Die roten Linien markieren das Intervall einer Umlaufzeit $\tilde{T}_p = 2\pi/\tilde{\omega}_p$.

5.4.5 Der klassische Grenzfall

Nun bleibt noch der in Abschnitt 3 bereits erwähnte klassische Grenzfall (3.21) zu diskutieren, mit $N \rightarrow \infty$ unter der Bedingung, dass UN konstant gehalten wird. Nach den Gleichungen für die Kollaps- und Revivalzeit (5.29) und (5.28) geht in diesem Fall zwar die Revivalzeit gegen unendlich, was für eine echte Relaxation der Populationsdifferenz in einen stationären Zustand notwendig ist. Andererseits aber wächst auch die Kollapszeit mit \sqrt{N} , so dass diese ebenfalls gegen unendlich geht, wenngleich langsamer als die Revivalzeit. Im klassischen Grenzfall existiert also für das Doppelmuldenpotential keine echte Relaxation der Populationsdifferenz, obwohl das System unendlich viele Freiheitsgrade besitzt. Weiterhin zeigt die analytische semiklassische Formel für die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz (5.25), dass die auftretenden Kollapse immer gaußscher Form sein werden, die aufgrund des Faktors $(1 + A^2)^{-1/4}$ in (5.25) leicht verzerrt ist. Dies ist allerdings auf die Wahl des Anfangszustandes zurück zu führen, der in der vorliegenden Arbeit und in der Literatur als gaußsch angenommen wird. Somit wird der Zerfall unabhängig von der Teilchenzahl niemals eine beispielsweise exponentielle Form annehmen.

Insgesamt konnte die semiklassische Analyse des Doppelmuldenproblems und in deren Folge die analytische Formel (5.25) Aufschluss geben über sämtliche Merkmale und Eigenheiten der Dynamik und deren Abhängigkeiten von den relevanten Systemparametern N , T , U und j_0 im Bereich der Plasmaoszillationen.

6 Semiklassische Propagation des Doppelmuldensystems

Für die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz der ultrakalten Bosonen im Doppelminimum konnte im letzten Kapitel erfolgreich ein geschlossener analytischer Ausdruck hergeleitet werden. Was sich aufgrund der Einfachheit und Integrabilität des Doppelmuldensystems realisieren ließ, wäre unter den komplexeren Bedingungen wie z.B. beim Übergang zu mehreren Moden nicht mehr möglich. Als Erkenntnisgewinn ist jedoch zu verzeichnen, dass analytische semiklassische Methoden sinnvoll auf das Doppelmuldensystem ultrakalter Bosonen angewendet werden können, solange die involvierten Wechselwirkungsstärken klein genug sind, sich das System also im Regime der Plasmaoszillationen befindet.

Daher sollen in einem weiteren Schritt echte semiklassische Propagationen mithilfe von semiklassischen Propagatoren angegangen werden. Mit ihrer Hilfe lässt sich der volle N -Teilchenzustand erfassen und somit über reduzierte Größen wie die Populationsdifferenz hinausgehen. Wie bereits gezeigt können semiklassische Methoden offenbar Systeme, die aus einer großen Anzahl ultrakalter Bosonen bestehen, gut beschreiben, den erwähnten klassischen Grenzfall (3.21) sogar besonders exakt. Andererseits sind gerade Systeme von Interesse, bei denen größere Wechselwirkungsstärken involviert sind, weil sie sich hervorragend eignen zur Untersuchung einer Relaxation reduzierter Größen in Quantensystemen, wie sie in der Einleitung angesprochen wurde. Daher werden im Folgenden semiklassische Propagatoren auf das Doppelmuldensystem angewendet. Die resultierenden Ergebnisse sollen den numerisch exakten Ergebnissen aus Kapitel 4 und der TWA gegenüber gestellt werden.

6.1 Truncated Wigner Approximation im Doppelmuldensystem

In Abschnitt 3.3 wurde die TWA für den allgemeinen Fall eines Quantensystems eingeführt, in dem mehrere Moden besetzt sind. Diese Näherung wurde bereits mehrfach erfolgreich auf Systeme ultrakalter Bosonen in Doppelmuldenpotentia-

len oder mehreren Töpfen [117, 118, 119] angewendet, indem die Wignerfunktion in Abhängigkeit der komplexen Amplituden α der besetzten Moden behandelt wurde. Für das Doppelmuldensystem bietet es sich jedoch an, die Wignerfunktion in der Anzahl-Phasen-Basis darzustellen (4.16), wie sie in Abschnitt 4.3.2 zur Abbildung der Wellenfunktion im Phasenraum eingeführt wurde.

Zur Zeitableitung der Wignerfunktion (4.16) konnte gezeigt werden [120], dass die Propagation in der Anzahl-Phasen-Darstellung stabiler ist als das Äquivalent in der komplexe-Amplituden-Darstellung. Für große Teilchenzahlen wurde dort nach einigen Näherungen, die letztlich äquivalent zur TWA sind, wieder eine klassische Liouville-Gleichung für die Wignerfunktion hergeleitet

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\varphi, n) = \{H(\varphi, j), W(\varphi, j)\} .$$

Dabei bezeichnet $\{\dots\}$ die Poissonklammer und $H(\varphi, j)$ die klassische Hamiltonfunktion für das Doppelmuldenproblem (4.9) aus Abschnitt 4.2.2, für deren Ableitungen wieder die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (4.10) einzusetzen sind. Im Unterschied zur rein klassischen Dynamik aus Abschnitt 4.2.2 wird hier allerdings nicht nur eine Trajektorie betrachtet, sondern die gesamte Wignerverteilung eines Zustandes. Trotz der klassischen Bewegungsgleichungen ist also der Quantencharakter der Wellenfunktion in der Unbestimmtheit des Anfangszustandes in Ort und Impuls, bzw. hier in Phase und Anzahl, enthalten. Jedoch wurden die höheren Ableitungsterme der exakten Zeitentwicklung der Wignerverteilung (2.15) vernachlässigt, so dass die TWA nur für hinreichend glatte Wignerverteilungen eine gute theoretische Beschreibung sein kann.

In der Praxis wird die Wignerfunktion (4.16) des Anfangszustandes ψ_0 gesampelt. Da der Schnitt durch die Wignerfunktion einer gaußschen Wellenfunktion gerade deren Betragsquadrat (in der zum Schnitt gehörenden Basis) entspricht, wurde hier der analytisch bestimmte Grundzustand des gekippten Systems (5.15) aus Abschnitt 5.2.1 mithilfe des Box-Muller-Verfahrens [64] gesampelt und jede einzelne Trajektorie dann mithilfe der Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (4.10) in der Zeit entwickelt. Zur Bestimmung von Erwartungswerten erfolgte letztendlich eine Aufsummierung der Trajektorien. Für die Datenbasis der Abbildungen 6.1 und 6.2 wurden jeweils 10^4 Trajektorien gesampelt. Die zwei Graphiken zeigen für verschiedene Werte von Λ und Anfangsauslenkungen die Zeitentwicklung der Populationsdifferenz und zwar als Ergebnisse der TWA bzw. als numerisch exakte im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung. Für $\Lambda = 0.01$ bis $\Lambda = 100$ decken die Graphiken also sowohl den Bereich aller drei möglichen Regime als auch die von der Anfangsauslenkung abhängigen Bereiche des “Self-Trappings” und den durch die Separatrixen der hyperbolischen Fixpunkte eingeschlossenen Bereich der Plasmaoszillationen ab.

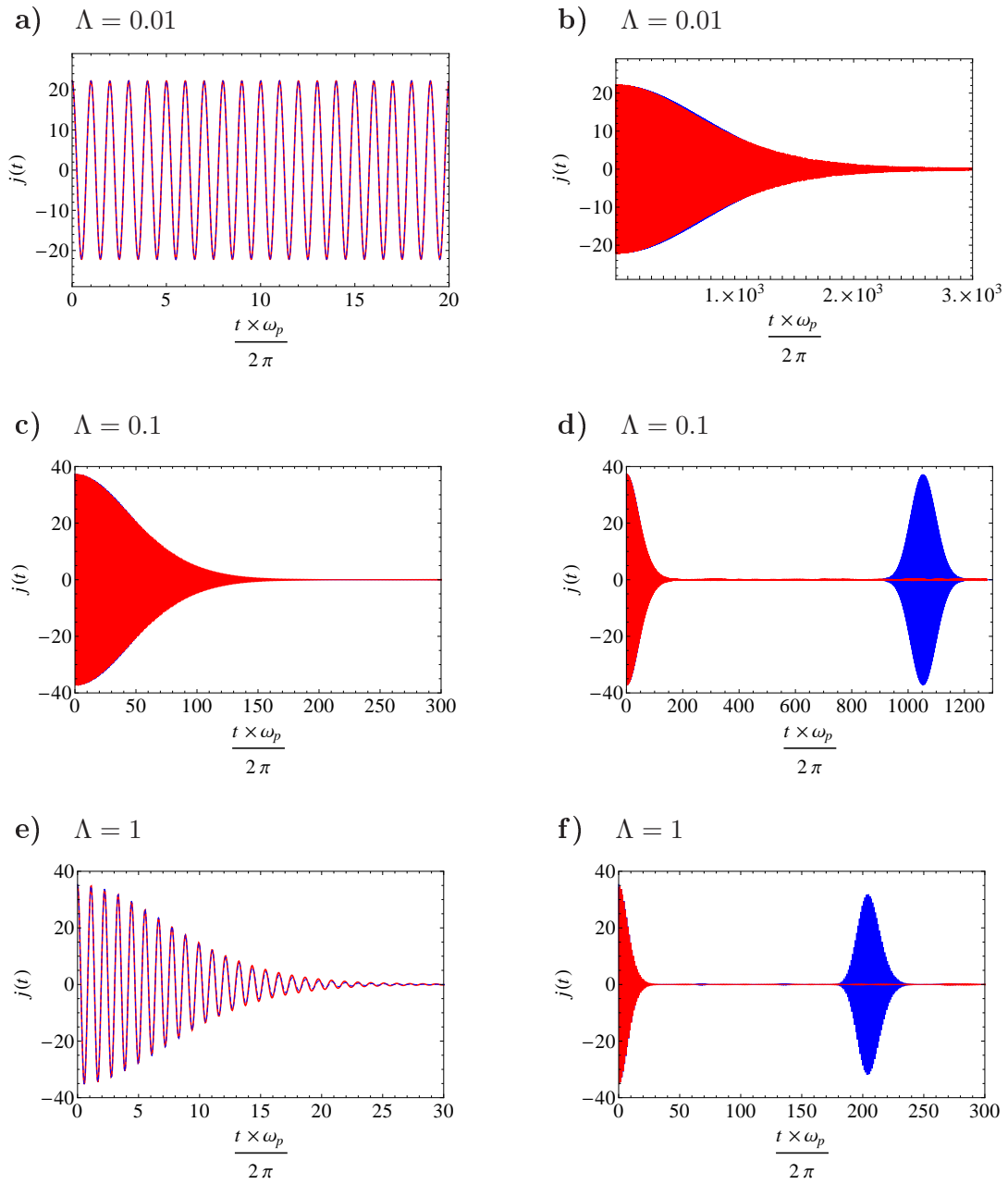


Abbildung 6.1: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe der TWA durch die Propagation von 10.000 Trajektorien berechnet (rote durchgezogene Linie) für verschiedene kleine Werte von Λ für $N = 100$ und $T = 10$ für jeweils verschiedene Zeitfenster.

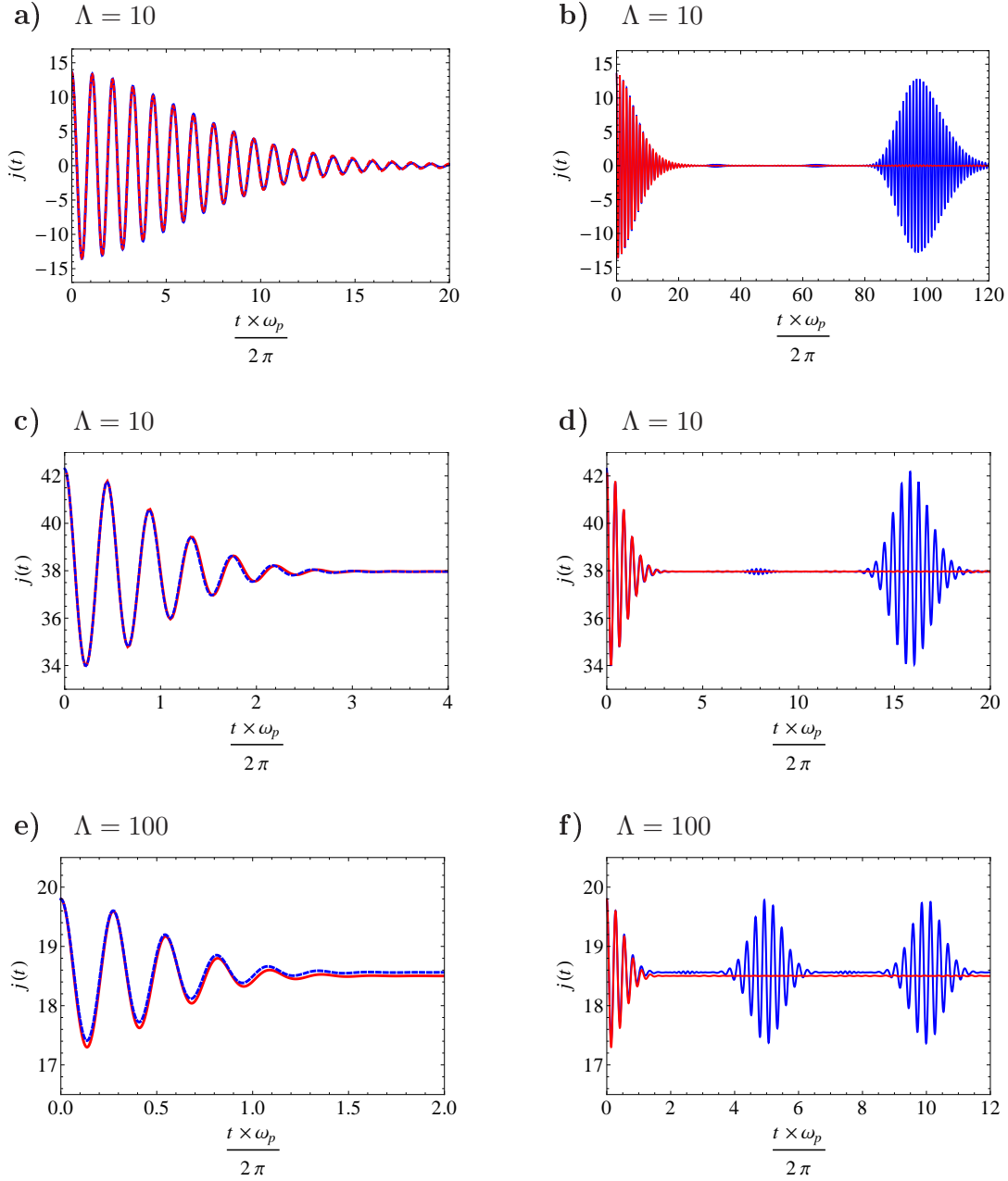


Abbildung 6.2: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe der TWA durch die Propagation von 10.000 Trajektorien berechnet (rote durchgezogene Linie) für diverse große Werte von Λ für $N = 100$ und $T = 10$ für jeweils verschiedene Zeitfenster. a) und b) zeigen die Zeitentwicklung eines Wellenpakets im Regime der Plasmaoszillationen und c) bis f) im "Self-Trapping-Bereich".

Für alle Werte von Λ und alle in den Abbildungen gezeigten Anfangsbedingungen beschreibt die TWA die Dynamik offenbar sehr gut. Besonders auf der Zeitskala bis zum ersten Revival scheint die TWA ausgesprochen genau zu sein – die Oszillationen und der Zerfall der Populationsdifferenz werden nahezu exakt reproduziert. Somit geht die TWA bedeutend über die rein klassische Näherung aus Abschnitt 4.2.2 hinaus. Die Vorstellung im Phasenraum erklärt den Hintergrund: Es wird eben gerade nicht nur eine Trajektorie im Phasenraum betrachtet, sondern ein ganzes Wellenpaket, welches genau wie es in Abschnitt 4.2.2 diskutiert wurde im Phasenraum mit der Zeit zerfließt, wodurch die Populationsdifferenz gegen null geht.

Die Revivals können allerdings nicht mithilfe der TWA reproduziert werden. Auch diese Tatsache ist einfach zu erklären. Die Revivals sind zurückzuführen auf wahre Quanteneigenschaften des Systems, nämlich die Kohärenzen. Bei der TWA werden die einzelnen Trajektorien zwar gesampelt, jedoch unabhängig voneinander propagiert, also ohne Berücksichtigung der Phasen der Trajektorien. Somit lässt sich ein Revival nicht mithilfe der TWA beschreiben. Dies ist auch in der Abbildung (4.16) zu sehen. Eine anfänglich glatte Wignerverteilung wird mit der Zeit unregelmäßig, so dass die höheren Ableitungen in (2.15) durchaus relevant werden. Letztlich finden die Anmerkungen aus Abschnitt 3.3 Bestätigung, dass mit der TWA keine “wahren Quantenzustände” zu beschreiben sind, deren Wignerfunktion negative Werte annimmt bzw. nicht mehr hinreichend glatt ist.

Der Vollständigkeit halber soll noch der Fall betrachtet werden, dass das anfängliche Wellenpaket im Phasenraum von der Separatrix geschnitten wird. Hier liefert die TWA keine brauchbaren Ergebnisse. Besonders wenn vergleichbar große Anteile der Wellenfunktion auf die beiden Bereiche des “Self-Trappings” und den der Plasmaoszillationen verteilt sind, entsteht eine unregelmäßige Dynamik wie es in den Abschnitten 4.3.1 und 4.3.2 (siehe Abbildung 4.17) erörtert wurde. Dies ist keine große Überraschung vor dem Hintergrund, dass die rein klassische Dynamik selbst auf sehr kleinen Zeitskalen versagt. Da die TWA auf ebendieser basiert, war hier keine große Steigerung zu erwarten. Die Abbildung 6.3 zeigt einen Vergleich der numerisch exakten Dynamik mit der TWA in einem solchen Bereich unregelmäßiger Dynamik.

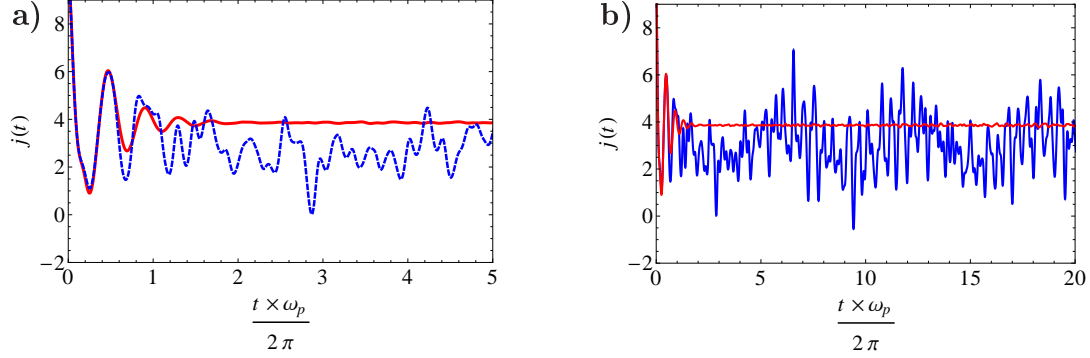


Abbildung 6.3: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe der TWA durch die Propagation von 10.000 Trajektorien berechnet (rote durchgezogene Linie) für $N = 100$, $\Lambda = 100$, $T = 10$ und $j_0 \approx 10$ für verschiedene Zeitfenster. Für diese Parameter liegt die anfängliche Wellenfunktion sowohl im STR als auch im Bereich der Plasmaoszillationen (siehe Abbildung 4.17).

Die TWA beschreibt die Dynamik der Populationsdifferenz auf der Zeitskala bis zum ersten Revival sehr gut, abgesehen von dem unregelmäßigen Spezialfall in der Nähe der Separatrix. Wie bereits dargestellt hängt diese Zeitskala von der Wechselwirkungsstärke U ab: je kleiner diese, desto länger die Revivalzeit. Im klassischen Grenzfall ist die TWA offensichtlich exakt. Da in diesem aber die rein klassische Lösung gleiche Genauigkeit erreicht, würde das Anwenden der TWA nur unnötigen Mehraufwand verursachen. Für große Werte von U hingegen wird die Zeitskala, auf der die TWA exakt ist, sehr klein, so dass zum Beschreiben des Systems andere Methoden zur Verfügung stehen müssen. Daher sollen im nächsten Abschnitt eine semiklassische Propagation unter Berücksichtigung der Phasen durchgeführt und die Ergebnisse mit denen der TWA verglichen werden.

6.2 Anwendung des HK-Propagators auf das Doppelmuldensystem

Da der in der Zeit zu entwickelnde Zustand nahezu gaußsch ist, bietet sich die Anwendung des HK-Propagators auf das Doppelmuldensystem an. In dem nach den Vorüberlegungen von Abschnitt 5.2.1 in analytischer Form bekannten Anfangszustand (5.15) lässt sich das γ der kohärenten Zustände (3.13) im Herman-Kluk-Propagator (3.14) mit σ^2 identifizieren. Die Auswertung des Herman-Kluk-Propagators für ein volles Feld (3.18) erscheint zwar reichlich kompliziert, allerdings vereinfacht sich der Propagator für den Fall der Zwei-Moden-Näherung dramatisch. Ausgehend von dieser ist der Phasenraum für das Doppelmuldenproblem zweidimensional, und es gelten die hamiltonschen Bewegungsgleichungen (4.10) aus Abschnitt 4.2.2.

Die Monodromiematrix (3.10) ist somit vom Rang zwei, und ihre Elemente folgen den Bewegungsgleichungen, die in Anhang B aufgeführt sind, unter der Anfangsbedingung (3.12) aus Abschnitt 3.2.2. Zusammen mit den Hamiltonschen Bewegungsgleichungen (4.10) und der Zeitentwicklung der Wirkung

$$\begin{aligned} \dot{S} &= \varphi \dot{j} - H(\varphi, j) = -2T \sqrt{(N+1)^2/4 - j^2} \varphi \sin \varphi \\ &\quad - \frac{1}{2} U N^2 + U N - 2U j^2 + 2T \sqrt{\left(\frac{(N+1)}{2}\right)^2 - j^2} \cos \varphi \end{aligned} \quad (6.1)$$

bestimmt dieser Satz klassischer Differentialgleichungen ((4.10), (6.1), (8.1) bis (8.4)) die gesamte Dynamik des zu propagierenden Wellenpakets. Auf einen kohärenten Anfangszustand angewendet, lässt sich der HK-Propagator für das Doppelmuldenproblem schreiben als

$$K(j_f, t; z_0, 0) = \int \frac{d\varphi_i dj_i}{2\pi\hbar} \langle j_f | z(t) \rangle R(\varphi_i, j_i, t) \exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\varphi_i, j_i, t)\right) \langle z_i | z_0 \rangle. \quad (6.2)$$

In der Praxis geht man folgendermaßen vor: Die Integration über den gesamten Phasenraum lässt sich auf einen Bereich einschränken, der durch den gaußschen Überlapp $\langle z_i | z_0 \rangle$ eingegrenzt wird. Letztlich wird der Realteil des Überlapps

$$\langle z_i | z_0 \rangle = \exp\left(-\frac{\gamma}{4}(j_i - j_0)^2 + \frac{i}{2\hbar}(j_i - j_0)(\varphi_i + \varphi_0) - \frac{1}{4\gamma\hbar^2}(\varphi_i - \varphi_0)^2\right) \quad (6.3)$$

durch Anwendung des Box-Muller-Verfahrens [64] ausgewürfelt, und das Integral mittels Monte-Carlo-Integration gelöst. Der Herman-Kluk-Vorfaktor $R(\varphi_i, j_i, t)$ wird gemäß (3.9) mithilfe der Elemente der Monodromiematrix für jeden Zeitschritt und jede Trajektorie berechnet, und ebenso der Phasenfaktor $\exp\left(\frac{i}{\hbar} S(\varphi_i, j_i, t)\right)$ und der Imaginärteil des Überlapps (6.3).

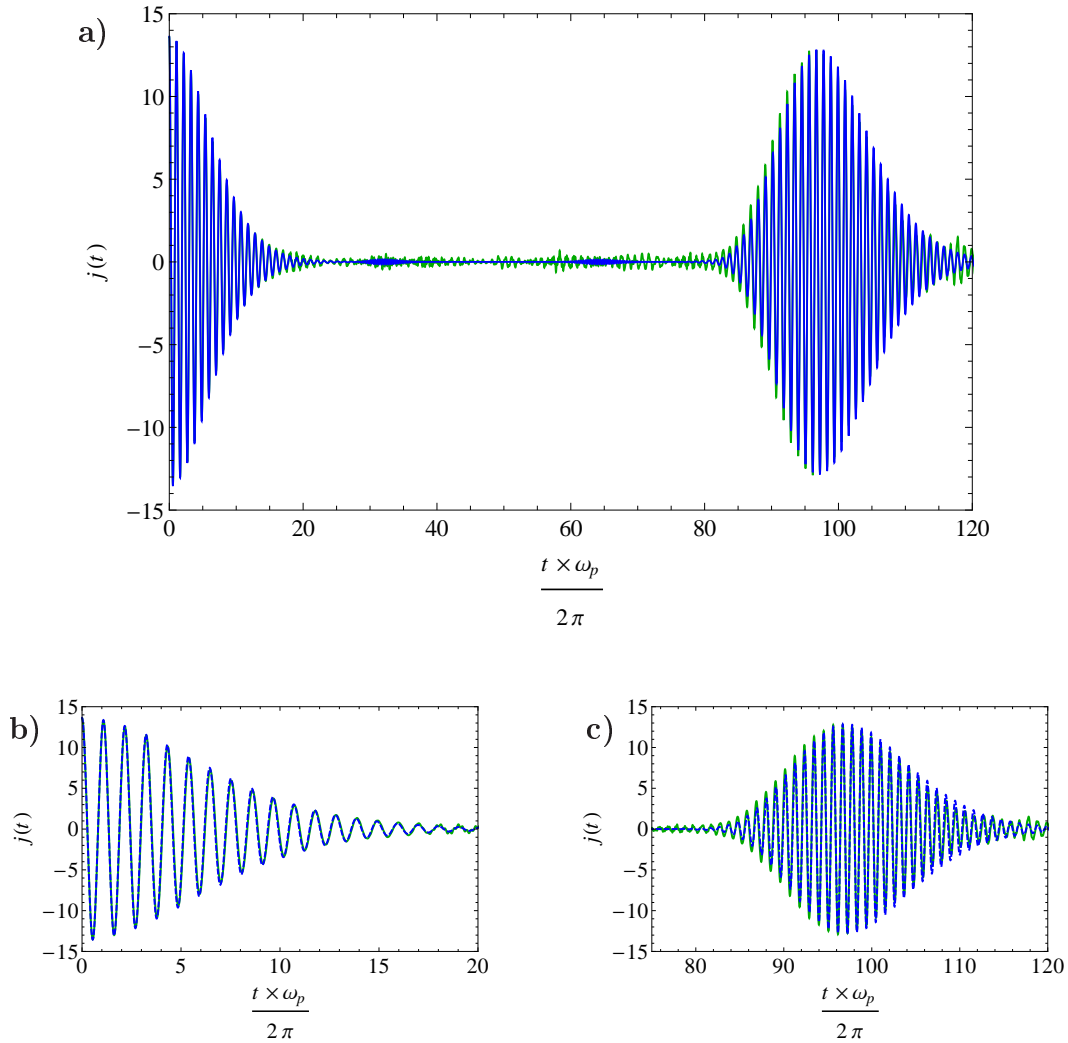


Abbildung 6.4: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe des HK-Propagators (unter Berücksichtigung von 10^4 gesampelten Trajektorien) berechnet (grüne Linie) für $\Lambda = 10$, $N = 100$, $T = 10$, Anfangsauslenkung $j_0 \approx 14$ und verschiedene Zeitfenster.

Die Abbildungen 6.4 bis 6.7 zeigen die auf den HK-Propagator zurückgehenden Ergebnisse im Vergleich zu den numerisch exakten für verschiedene Werte von Λ . Vorauszuschicken ist, dass die Propagation mithilfe semiklassischer Propagatoren nur für eingeschränkte Zeitintervalle Stabilität aufweist. Für das Doppelmuldenproblem scheinen die Propagationen nach Optimierung der Parameter für ca. 100 Oszillationsperioden stabil zu sein. Daher ist es nicht sinnvoll, den HK-Propagator auf das Doppelmuldenpotential für sehr kleine Werte von $\Lambda \ll 1$ anzuwenden.

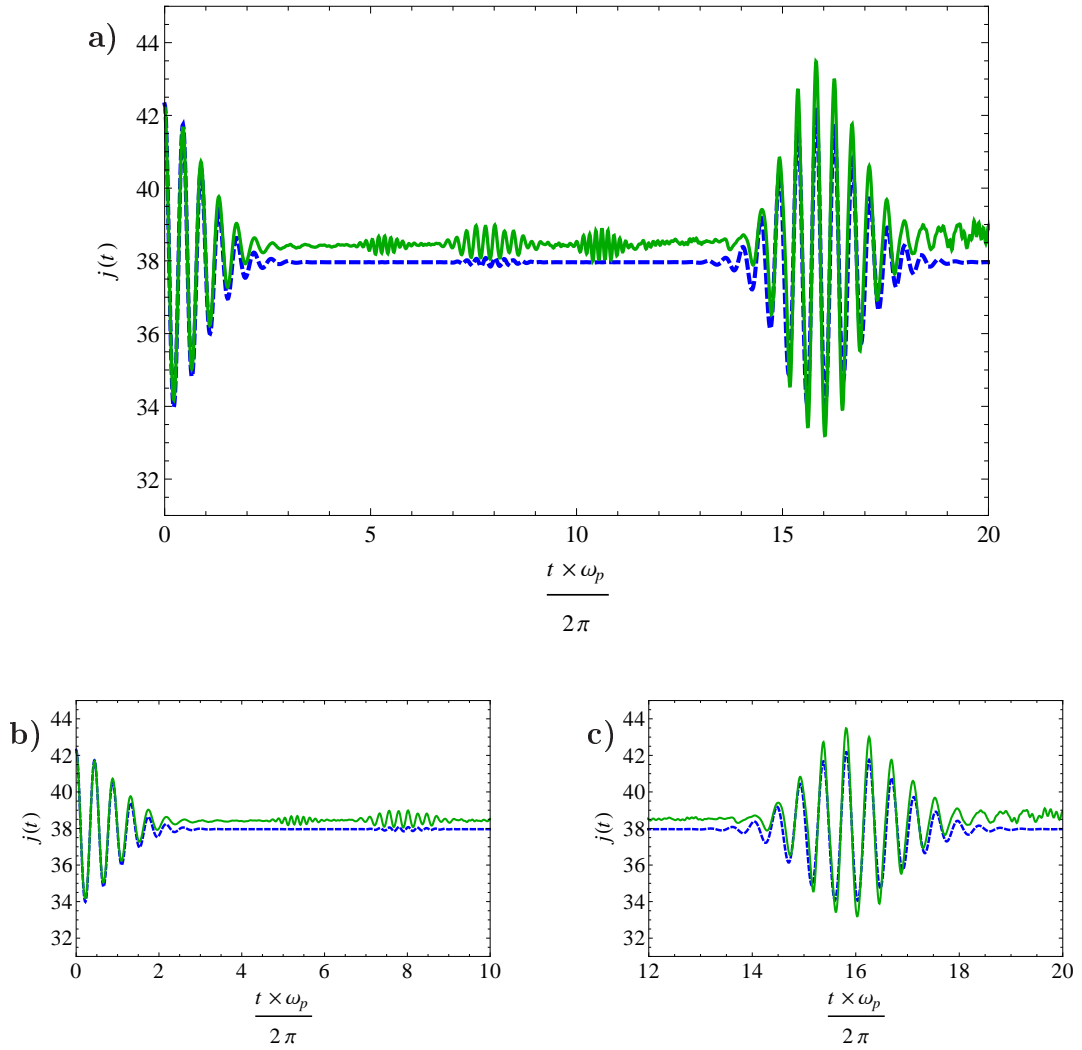


Abbildung 6.5: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe des HK-Propagators (unter Berücksichtigung von 10^4 gesampelten Trajektorien) berechnet (grüne Linie) für $\Lambda = 10$, $N = 100$, $T = 10$, Anfangsauslenkung $j_0 \approx 40$ und verschiedene Zeitfenster.

In diesem Rabi-Regime oszilliert die Populationsdifferenz j extrem lange, ehe die ersten wahren Quanteneigenschaften des Systems, also Kollapse und Revivals, auftreten (siehe Abbildung 6.1). Daher ist das System für sehr kleine Λ gut mit den rein klassischen Methoden (siehe Abschnitt 4.3.2) und sogar noch besser mithilfe der TWA (siehe Abschnitt 6.1) zu beschreiben. Für letztere wurde im vorangegangenen Abschnitt gezeigt, dass die Näherung bis kurz vor dem ersten Revival die exakte Numerik sehr gut erfasst. Daher kann die echte semiklassische Propagation in diesem Regime nicht über die TWA hinausgehen und umfassendere Ergebnisse liefern.

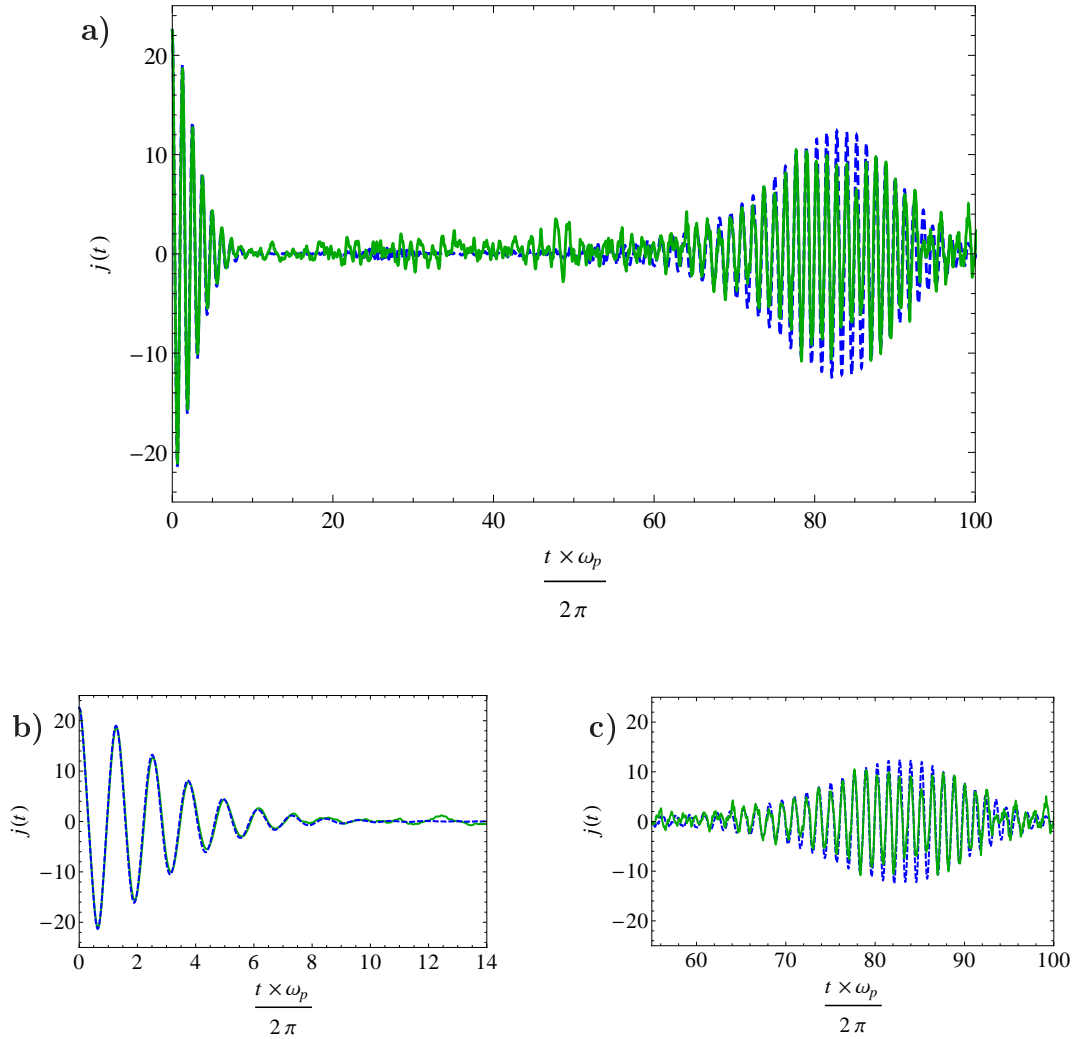


Abbildung 6.6: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe des HK-Propagators (unter Berücksichtigung von 10^4 gesampelten Trajektorien) berechnet (grüne Linie) für $N = 100$, $T = 10$, $\Lambda = 10$, $j_0 \approx 23$ und verschiedene Zeitfenster.

Für wachsendes Λ hingegen finden die wahren Quanteneffekte bereits auf wesentlich kleineren Zeitskalen statt, wie es in den Kapiteln 4 und 5 diskutiert wurde. Somit sollte die semiklassische Propagation im Josephson-Regime interessante Ergebnisse liefern. Diese gehen in der Tat aus den Abbildungen 6.4 bis 6.7 hervor, in denen eine Gegenüberstellung numerisch exakter Ergebnisse mit der semiklassisch propagierten Zeitentwicklung der Populationsdifferenz für diverse Werte von Λ und Anfangsauslenkungen erfolgt.

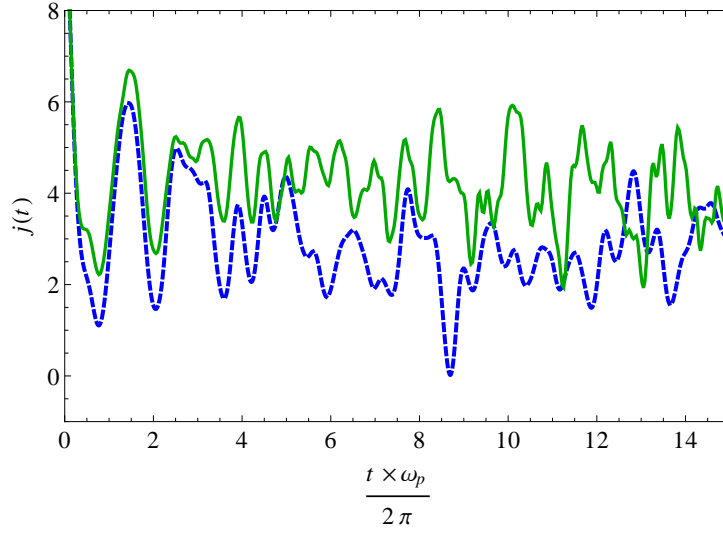


Abbildung 6.7: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe des HK-Propagators (unter Berücksichtigung von 10^4 gesampelten Trajektorien) berechnet (grüne Linie) für $N = 100$, $T = 10$, $\Lambda = 100$ und $j_0 \approx 8$. Aufgrund der Nähe der Anfangsauslenkung zur Separatrix ist die Dynamik unregelmäßig.

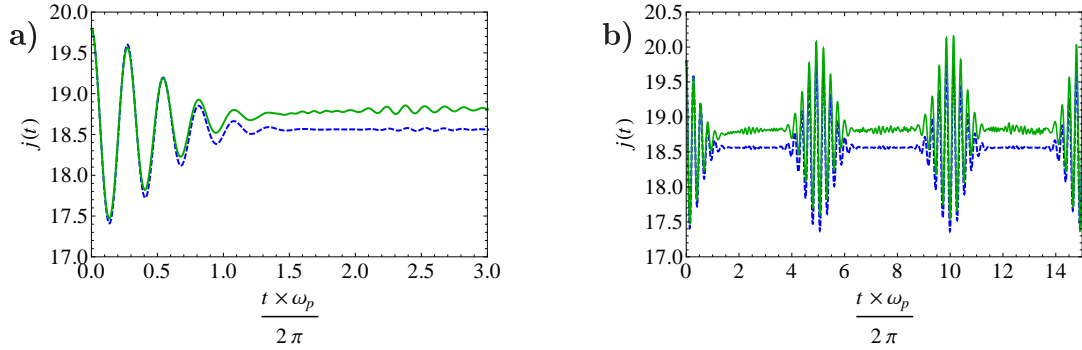


Abbildung 6.8: Dynamik der Populationsdifferenz im Doppelmuldenpotential numerisch exakt (blaue gestrichelte Linie) und mithilfe des HK-Propagators (unter Berücksichtigung von 10^4 gesampelten Trajektorien) berechnet (grüne Linie) für $N = 100$, $T = 10$, $\Lambda = 100$ und $j_0 \approx 20$ für verschiedene Zeitfenster.

Den Graphiken 6.4 bis 6.6 wurde $\Lambda = 10$ mit je verschiedenen Anfangsauslenkungen zugrunde gelegt. Die Abbildungen 6.4a) bis c) zeigen eine Dynamik im Bereich der Plasmaoszillationen, in dem der HK-Propagator die numerisch exakten Ergebnisse offensichtlich überaus genau wiedergibt.

Für dieses Regime ist die semiklassische Propagation sehr stabil und konvergiert schon für verhältnismäßig wenige gesampelte Trajektorien. Anders als mit der TWA werden die Revivals in vollem Umfang wiedergegeben (siehe insbesondere Abbildung 6.4c)).

Auch für eine Anfangsbedingung im “Self-Trapping”-Regime reproduziert die HK-Propagation die exakte Dynamik in vollem Umfang inklusive der Revivals (siehe 6.5) und geht damit über die analytischen Erkenntnisse aus Abschnitt 5 hinaus. Sogar die kleinen Zwischenrevivals werden von der HK-Propagation erfasst, allerdings geringfügig überschätzt (siehe 6.5a) und b)). Problematisch an der semiklassischen Beschreibung im STR ist jedoch dessen kontinuierlich wachsende Phase, weshalb es auch “Running-Phase”-Regime genannt wird. Dieser Sachverhalt ist in der Phasenraum-Abbildung 4.13 und aus den klassischen Bewegungsgleichungen (4.10) ersichtlich. Zwar ist der Phasenraum periodisch in 2π , die Phase allerdings nimmt beim Hinauslaufen aus diesem immer weiter zu. Als Folge ist die Norm der semiklassischen Wellenfunktionen im Propagator auf Dauer nicht stabil. Trotz Renormierung der Ergebnisse ist in Abbildung 6.5 ein leichter Versatz des vorübergehenden stationären Zustandes der Populationsdifferenz gegenüber den exakten Resultaten zu erkennen.

Im Bereich größerer Anfangsauslenkung kurz vor dem Übergang zum STR, in dem die Dynamik unregelmäßiger wird sowie die Revivals abflachen und breiter werden (siehe Abschnitt 4.3.1), liefert die semiklassische Propagation offensichtlich nicht mehr solch exakte Ergebnisse wie für die anderen Anfangsbedingungen (siehe Abbildung 4.3.1). Dies ist auf die Nähe von j_0 zu den Separatrixen im Phasenraum zurückzuführen: Wie in Abschnitt 4.3.2 diskutiert, setzt an den instabilen Fixpunkten ein Divergieren der Quantenmechanik von der klassischen Dynamik ein. Da nun die semiklassische Propagation auf den klassischen Bewegungsgleichungen aufbaut, muss sie in der Nähe der Separatrixen Ungenauigkeit entwickeln. Noch deutlicher geht dies aus der Abbildung 6.7 hervor, in der die Dynamik der Populationsdifferenz für $\Lambda = 100$ und ein j_0 , welches sehr nahe an der Separatrix liegt, dargestellt wird. Das anfängliche Wellenpaket ist in der Abbildung 4.17b) im Phasenraum zu sehen. Genau wie die TWA ist die semiklassische Propagation in diesem Fall nicht mehr in der Lage, die exakte Dynamik zu erfassen, und weist schlechte Konvergenzeigenschaften auf.

Die Graphik 6.8 nun zeigt wieder Daten für $\Lambda = 100$, allerdings mit einer Anfangsbedingung im STR. In diesem werden die exakten Ergebnisse mithilfe des HK-Propagators offenbar wieder gut nachgebildet. Erneut tritt hier das Problem in Form der stetig wachsenden Phase auf, das die Norm der semiklassischen Wellenfunktion instabil werden lässt. Der Versatz der semiklassischen Ergebnisse zu den numerisch exakten beruht auch hier auf einer leicht instabilen Gesamtteilchenzahl.

Die semiklassische Propagation ist also als eine Ergänzung der analytischen semiklassischen Betrachtungen aus Kapitel 5 anzusehen, deren Gültigkeit auf das Regime der Plasmaoszillationen beschränkt war. Da der zugehörige Bereich im Phasenraum für wachsendes Λ einen immer kleiner werdenden Anteil annimmt, war es besonders für große Werte von Λ (die in den aktuellen Experimenten durchaus erreicht werden) von immenser Bedeutung, ein weiteres theoretisches Werkzeug in Form des HK-Propagators zu finden.

Im Ergebnis beschreibt die HK-Propagation die numerische reduzierte Dynamik der Populationsdifferenz nicht nur bis kurz nach dem ersten Kollaps nahezu exakt. Diese bedeutende Verbesserung gegenüber der TWA liegt in der Fähigkeit des semiklassischen Propagators, die Revivals zu reproduzieren. Indem der HK-Propagator nämlich die quantenmechanischen Phasen $i\frac{S}{\hbar}$ einbezieht, geht er über die TWA hinaus. Auf dieser Basis lassen sich nun Interferenzeffekte berücksichtigen, die zu den quantenmechanischen Revivals der Wellenfunktion führen. Mithilfe des HK-Propagators können also alle charakteristischen Quanteneffekte beschrieben werden, und das sowohl im Regime der Plasmaoszillationen als auch im “Self-Trapping-Bereich”.

6.2.1 Semiklassische Wellenfunktion

Bisher wurde in diesem Kapitel nur die Dynamik einer reduzierten Größe, nämlich der Populationsdifferenz, betrachtet. Der Vorteil der semiklassischen Propagation gegenüber der Gross-Pitaevskii-Theorie und den analytischen semiklassischen Methoden aus Kapitel 5 liegt jedoch gerade in der Möglichkeit, die gesamte Wellenfunktion zu beschreiben. Die Abbildungen 6.9 und 6.10 zeigen einen Vergleich der numerisch exakten mit den durch die HK-Propagation gewonnenen Ergebnissen der Zeitentwicklung der Wellenfunktion im j -Raum für $N = 100$, $T = 10$ und $\Lambda = 10$ jeweils im plasmaoszillierenden (Abbildung 6.9) und im “Self-Trapping“-Regime (Abbildung 6.10). Während die Graphiken a) und b) die Zeitentwicklung jeweils auf einer Zeitskala bis kurz nach dem ersten Revival darstellen, geben die Graphiken c) und d) die Dynamik etwas detaillierter auf kleinerer Zeitskala bis kurz nach dem Kollaps der Wellenfunktion wieder. Zur Orientierung können die Abbildungen 6.4 und 6.5 herangezogen werden, die die reduzierte Dynamik der Populationsdifferenz für dieselben Parameter zeigen.

Anhand der Zeitentwicklung der Wellenfunktion sind die anfänglichen Oszillationen, der erste Kollaps und die Entstehung des ersten Revivals deutlich zu erkennen. In der Abbildung 6.9 findet das Revival an der Stelle $\omega_p t / 2\pi \approx 100$ statt, ebenso wie in Abbildung 6.4. Die semiklassischen HK-Ergebnisse reproduzieren die numerisch exakten offenbar außerordentlich genau. Nach einem prüfenderen Blick auf 6.9b) und 6.10b) wird deutlich, dass die semiklassische Propagation die kleinen

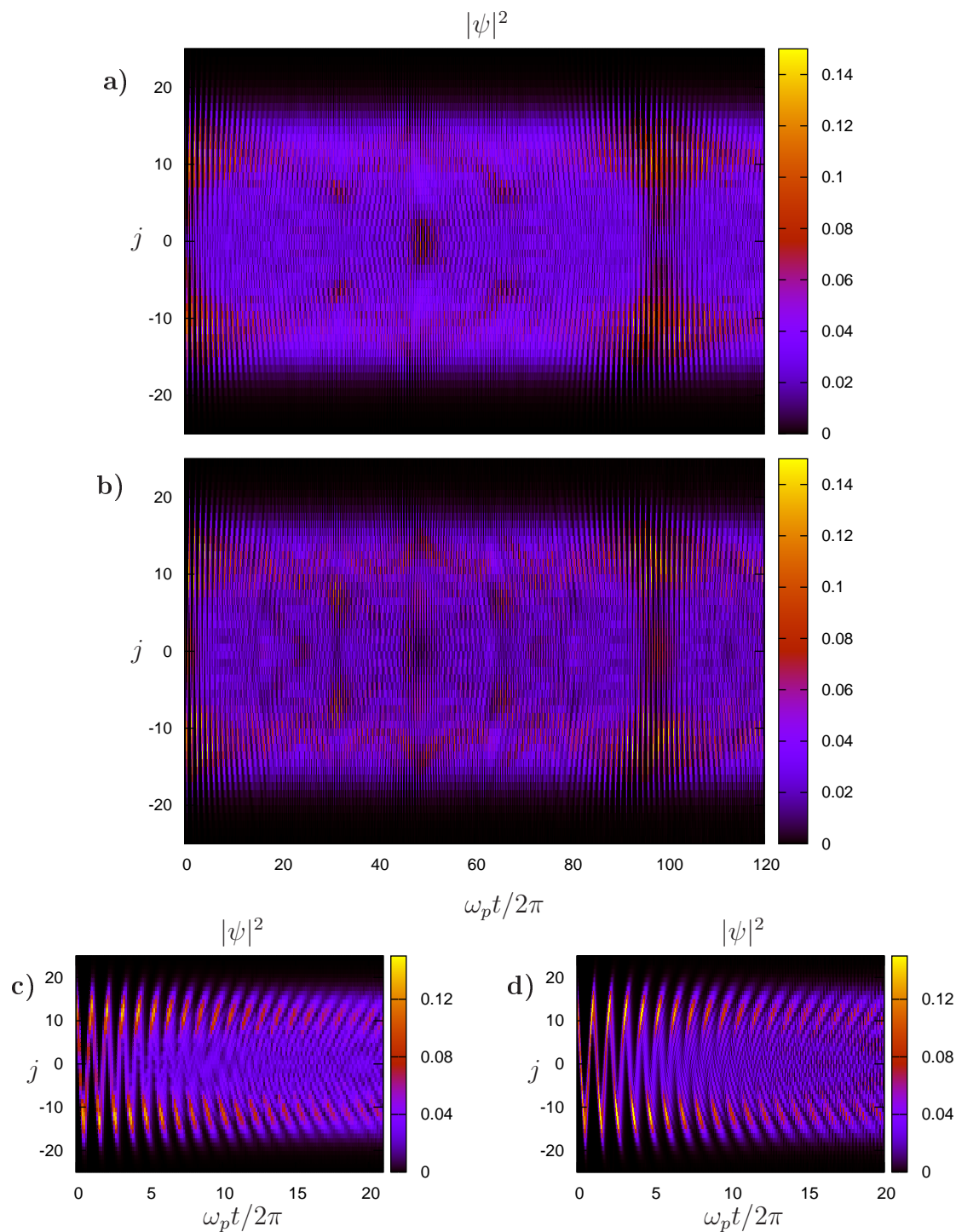


Abbildung 6.9: Dynamik der Wellenfunktion der ultrakalten Bosonen im j -Raum für das Doppelmuldenpotential numerisch exakt und mithilfe des HK-Propagators für 2×10^4 ausgewürfelte Trajektorien berechnet im Bereich der Plasmaoszillationen für $N = 100$, $T = 10$ und $\Lambda = 10$: Die Graphiken a) und c) stellen die exakte Numerik dar, b) und d) die Semiklassik.

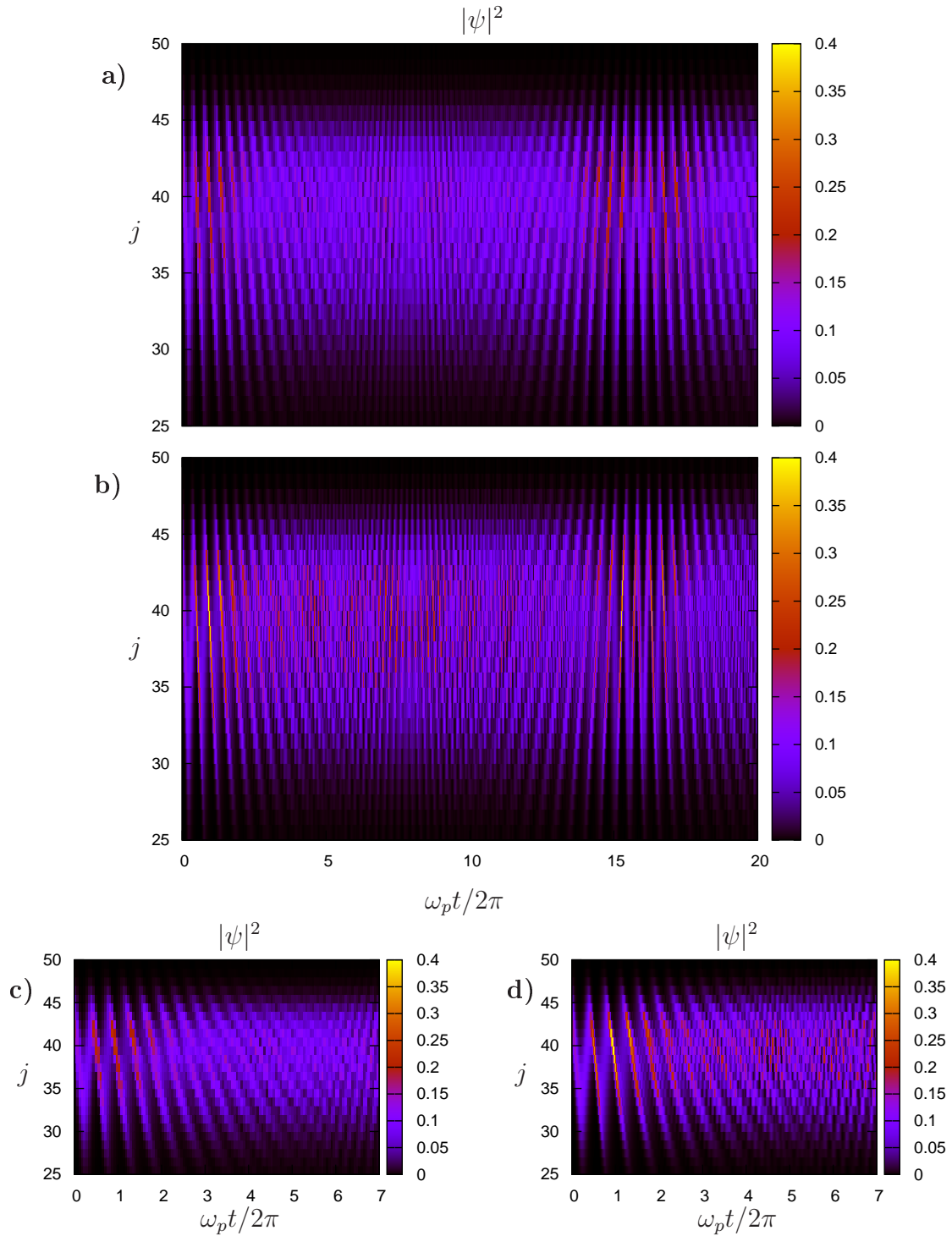


Abbildung 6.10: Dynamik der Wellenfunktion der ultrakalten Bosonen im j -Raum für das Doppelmuldenpotential numerisch exakt und mithilfe des HK-Propagators für 10^4 ausgewürfelte Trajektorien berechnet im "Self-Trapping"-Regime für $N = 100$, $T = 10$ und $\Lambda = 10$: Die Graphiken a) und c) stellen die exakte Numerik dar, b) und d) die Semiklassik.

Zwischenrevivals gegenüber der exakten Dynamik leicht überschätzt, wie es aus der Farbkodierung hervorgeht. Diese treten in erstgenannter Abbildung bei $\omega_p t/2\pi \approx 50$ und in der zweiten bei $\omega_p t/2\pi \approx 8$ ein. Schließlich wird aus den Abbildungen 6.9 und 6.10 ein weiteres Mal ersichtlich, warum die TWA die exakte Dynamik der Bosonen nur bis zum ersten Kollaps beschreiben kann. Offensichtlich verliert die Wellenfunktion nach dem ersten Kollaps ihre glatte Struktur und wird unregelmäßig, so dass die vernachlässigten Ableitungen höherer Ordnung in der Zeitentwicklung der Wignerverteilung (2.15) durchaus relevant werden.

Für den HK-Propagator konnte in diesem Kapitel also eine hervorragende Eignung zur Beschreibung nicht nur der reduzierten, sondern auch der vollen Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelminimum gezeigt werden. Allerdings ist die Betrachtung der Dynamik der Bosonen im Doppelminimum in der Populations- und Phasendifferenz-Darstellung problembehaftet in Bezug auf die semiklassische Propagation. Zwar ist nach [120] davon auszugehen, dass die Wahl dieser Darstellung für Untersuchungen mithilfe der TWA von Vorteil ist, da die Propagation in dieser Darstellung besser konvergiert.

Auf die HK-Propagation trifft dies jedoch nur bedingt zu. Wie in Abschnitt 3.2.2 beschrieben, werden in dieser einzelne Trajektorien propagiert, die letztlich die Zentren der kohärenten Zustände $\langle j_f | z(t) \rangle$ im HK-Propagator (6.2) darstellen. Aus der Endlichkeit des Phasenraums in der Populationsdifferenz in der j - und φ -Darstellung (Reichweite offensichtlich von $j = -N/2$ bis $j = N/2$) können daher Probleme erwachsen. Sobald Trajektorien zu nah an die Phasenraumgrenze propagiert werden, liegt der kohärente Zustand $\langle j_f | z(t) \rangle$ nicht vollständig im Phasenraum, wird also abgeschnitten. Diese Trajektorien gehen nicht mit der korrekten Norm in die Integration ein und müssen somit verworfen werden.

Je nach Wahl der Breiten der kohärenten Zustände γ und vor allem nach Wahl der Anfangsauslenkungen j_0 kann eine große Anzahl zu verwerfender Trajektorien auftreten. Im Doppelmuldensystem spielen die zu verwerfenden Trajektorien noch keine große Rolle, da hier der Phasenraum komplett regulär und die Dynamik integrabel ist. Sie werden allerdings zum Problem im endlichen Phasenraum des Drei-Topf-Systems, in dem die Dynamik zusätzlich chaotisch werden kann. Hier wächst die Wahrscheinlichkeit, dass Trajektorien dem Rand des Phasenraums sehr schnell sehr nahe kommen und verworfen werden müssen.

Für die semiklassische HK-Propagation konnte in diesem Kapitel gezeigt werden, dass sie sich hervorragend zur Beschreibung ultrakalter Bosonen im Doppelminimum im Rahmen der Zwei-Moden-Näherung eignet. Von dem seltenen Fall einer unregelmäßigen Dynamik in der Nähe der Separatrixen abgesehen, ließen sich die charakteristischen Eigenschaften der Dynamik vollständig reproduzieren. Die semiklassischen Propagationen erweisen sich also als eine interessante und vor allem bedeutende Alternative zur TWA, die eben noch nicht in der Lage war, die Quantenrevivals der Wellenfunktion zu beschreiben.

7 Dynamik im Drei-Topf-System

Dass sich semiklassische Methoden ausgezeichnet zur Beschreibung der Dynamik ultrakalter Bosonen im Doppelmuldenpotential eignen, für welches der Phasenraum integrabel ist, konnte bereits gezeigt werden. Da das Fernziel allerdings die semiklassische Behandlung ultrakalter Bosonen in ausgedehnten optischen Gittern ist, und auch experimentell immer neue Fallengeometrien erschlossen werden [121], die es zu beschreiben gilt, soll in diesem Kapitel noch einen Schritt weiter gegangen und ein System aus drei gekoppelten Potentialtöpfen untersucht werden.

Schon im Fall des Doppelmuldenpotentials stellte sich die Dynamik der Bosonen durch das Wechselspiel von Tunneldynamik einerseits und Nichtlinearität der Wechselwirkung andererseits als höchst interessant dar. War das Doppelmulden-system noch integrabel, so gilt dies für das Drei-Topf-System (DTS) nicht mehr. Eine resultierende Dynamik, die sogar noch reicher an Phänomenen und Eigenschaften ist [122, 123, 124], und immer neue experimentelle Möglichkeiten, solche Systeme in die Realität umzusetzen [125, 79], ließen das DTS zu einem beliebten Forschungsmodell werden. In der Literatur lassen sich bereits Aussagen zum dynamischen Verhalten ultrakalter Bosonen im Drei-Topf-System finden.

Trotz der Einfachheit des Modells ist die korrespondierende Dynamik geprägt von einer starken inneren Instabilität und damit einhergehendem chaotischem Verhalten [122, 126, 127] als Folge der Kombination aus dem nichtlinearen Charakter, hervorgerufen durch die Wechselwirkung der Bosonen untereinander, und der Nichtintegrabilität des Systems. Unter chaotischem Verhalten ist hier und in der Regel ein Auftreten positiver Lyapunov-Exponenten zu verstehen, in dessen Folge Trajektorien, die sich anfänglich in unmittelbarer Nähe voneinander befinden, mit der Zeit exponentiell auseinanderlaufen. Die maximalen Lyapunov-Exponenten wurden für das ultrakalte bosonische DTS in [122] untersucht.

Je nach Größe der Systemparameter lassen sich im DTS – ähnlich wie im Fall des Doppelminimums – verschiedene Regime mit dazugehörigen Phasenraumbereichen abgrenzen. Unter gewissen Bedingungen durchläuft das System reguläre Dynamik wie nicht-lineare Plasmaoszillationen und den bereits aus den Kapiteln 4 und 5 bekannten “Self-Trapping-Effekt” [123, 124, 127]. Dieses Verhalten wird auf Subregime zurückgeführt, für die die Dynamik integrabel ist. Andererseits tritt zusätzlich chaotische Dynamik auf in Phasenraumbereichen außerhalb dieser inte-

graben Subregionen. Bildlich gesprochen besteht der Phasenraum aus “regulären Inseln” umgeben von “chaotischer See”.

Im Anschluss an die Behandlung des theoretischen Modells, in dessen Rahmen die Dynamik der ultrakalten Bosonen im DTS zu beschreiben sein wird (Abschnitt 7.1), sollen also ähnlich wie im Fall des Doppelmuldenproblems die rein klassische Dynamik, die “Truncated Wigner Approximation” und die Herman-Kluk-Propagation vorgestellt werden. Die jeweiligen Ergebnisse werden schließlich im Vergleich zur numerisch exakten Dynamik präsentiert und erörtert (Abschnitt 7.2).

7.1 Theoretische Beschreibung der Dynamik im DTS

Analog zur theoretischen Beschreibung ultrakalter Bosonen im Doppelminimum dient als Ausgangspunkt der Vielteilchenhamiltonoperator (2.1). Erneut ist bei ultrakalten Gasen davon auszugehen, dass lediglich die niedrigsten Moden im Potential besetzt sind. Der Bose-Hubbard-Hamiltonian ergibt sich also in diesem Fall als

$$\hat{H}_{BH3} = U(\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 \hat{c}_1 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 \hat{c}_2 + \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_3 \hat{c}_3) - T_{12}(\hat{c}_1^\dagger \hat{c}_2 + \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_1) - T_{23}(\hat{c}_2^\dagger \hat{c}_3 + \hat{c}_3^\dagger \hat{c}_2). \quad (7.1)$$

Wie in Kapitel 4 stehen \hat{c}_i^\dagger und \hat{c}_i für die Erzeuger und Vernichter eines Teilchens im i -ten Topf. Der bereits in Abschnitt 4.2.1 eingeführte Parameter U bezeichnet ein Maß für die Stärke der Wechselwirkung der Bosonen untereinander. Zur Vereinfachung des Modells wurde angenommen, dass die drei Potentialtöpfe in einer Linie aufgereiht sind. In dieser Anordnung ist Tunneln lediglich zwischen Topf eins und zwei (Tunnelparameter T_{12}) sowie Topf zwei und drei (Tunnelparameter T_{23}) möglich. Tunneleffekte höherer Ordnung werden in dem Modell vernachlässigt.

Zwar lässt sich selbstverständlich mit Numerik manch Ergebnis erzielen, jedoch wächst die Dimension des DTS nicht mehr linear mit der Anzahl der involvierten Teilchen wie beim Doppelmuldensystem, sondern quadratisch mit N : Die Dimension ergibt sich zu $(N+2)(N+1)/2$ und stellt die Anzahl der Varianten dar, die N ununterscheidbaren Teilchen auf drei Töpfe zu verteilen. Das Diagonalisieren des Hamiltonoperators ist also auf wenige hundert Teilchen beschränkt, so dass die Hoffnung sogar noch stärker auf den Möglichkeiten der semiklassischen Methoden ruht als im Fall des Doppelmuldensystems.

Wie für das Zwei-Moden-Modell ist es sinnvoll, eine allgemeine Wellenfunktion in den Fock-Zuständen $|n_1, n_2, n_3\rangle$ zu entwickeln, so dass

$$|\psi\rangle = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} c_{n_1,n_2,n_3} |n_1, n_2, n_3 = N - n_1 - n_2\rangle .$$

Die Summe läuft über alle Möglichkeiten, die N Atome in den drei Töpfen zu verteilen. Die Zeitentwicklung der Wellenfunktion ist dann analog zu Abschnitt 4.3.1 zu schreiben als

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1+n_2+n_3=N} b_{n_1,n_2,n_3} e^{-iE_{n_1,n_2,n_3}t/\hbar} |\phi_{n_1,n_2,n_3}\rangle ,$$

wobei die $|\phi_{n_1,n_2,n_3}\rangle$ die $(N+2)(N+1)/2$ Eigenfunktionen des Bose-Hubbard-Hamiltonians (7.1) mit den dazugehörigen Eigenenergien E_{n_1,n_2,n_3} sind, welche durch das Diagonalisieren des Hamiltonoperators gewonnen werden. Die Koeffizienten $b_{n_1,n_2,n_3} = \langle \phi_{n_1,n_2,n_3} | \psi_0 \rangle$ enthalten die Information über die Anfangswellenfunktion $|\psi_0\rangle$. Da in den Experimenten gewöhnlich die Anzahl der Teilchen in den Töpfen gemessen wird, soll entsprechend die Dynamik der Erwartungswerte der Anzahloperatoren untersucht werden. Weil auch hier die Gesamtzahl der Atome N als konstant angenommen wird, ist es ausreichend, die Teilchenzahlen in zwei der drei Töpfe zu diskutieren, also $\langle \hat{c}_1^\dagger \hat{c}_1 \rangle$ und $\langle \hat{c}_2^\dagger \hat{c}_2 \rangle$. Um überhaupt Dynamik im DTS zu initiieren, muss das System mithilfe eines “Quench” aus dem Gleichgewicht gebracht werden, z.B. ähnlich wie in Kapitel 4 durch eine Verkipfung des Potentials. Der Grundzustand des gekippten Systems wird zum Anfangszustand im ungekippten System, analog zu dem Fall des Doppelminimums. In der vorliegenden Arbeit wird für die Verkipfung von einem weiteren Term im Bose-Hubbard-Hamiltonian ausgegangen

$$\hat{H}_{BH3,\delta} = \hat{H}_{BH3} + \delta(\hat{n}_1 - \hat{n}_2) . \quad (7.2)$$

Dieser führt zu einer unausgeglichene anfänglichen Teilchenzahl in den Töpfen und initiiert somit die Dynamik.

Die Aspekte der komplexen und überaus interessanten Dynamik im DTS wurden in der Literatur bereits ausführlich theoretisch erörtert (siehe [123, 124, 122, 127]). Um diese Ergebnisse kurz vorstellen zu können, soll im Folgenden die rein klassische Näherung eingeführt werden, auf der die Untersuchungen unter anderem beruhen und die einen Einblick in die Ursprünge der komplexen Dynamik im DTS bietet. Die Näherung folgt wiederum aus der rein klassischen Gross-Pitaevskii-Approximation. Analog zu Abschnitt 4.2.2 werden die Operatoren ersetzt gemäß

$$\begin{aligned} \hat{c}_i &\Rightarrow \sqrt{n_i(t)} e^{i\phi_i(t)} \\ \hat{c}_i^\dagger &\Rightarrow \sqrt{n_i(t)} e^{-i\phi_i(t)} , \end{aligned}$$

wobei die n_i wieder die Teilchenzahlen im i -ten Topf mit den dazugehörigen Phasen ϕ_i bezeichnen. Nach dem Ersetzen der Operatoren durch komplexe Amplituden ergibt sich die klassische Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned} H(n_1, n_2, \varphi_1, \varphi_2) &= U(n_1^2 + n_2^2 + (N - n_1 - n_2)^2) \\ &- 2T_{12}\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}\cos(\varphi_1) \\ &- 2T_{23}\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}\cos(\varphi_2) . \end{aligned} \quad (7.3)$$

Hier wurde bereits die feste Gesamtteilchenzahl N genutzt, und die Phasendifferenzen wurden ersetzt wie folgt: $\varphi_1 = \phi_1 - \phi_2$, $\varphi_2 = \phi_2 - \phi_3$. Die Dimension des Phasenraums reduziert sich somit auf $D = 4$. Zur besseren Übersichtlichkeit wird im Folgenden $T_{12} = T_{23} = T$ angenommen. Gemäß der detaillierten Ausführung in [127] findet man für die klassische Hamiltonfunktion (7.3) die hamiltonschen Bewegungsgleichungen

$$\dot{n}_1 = \frac{\partial H}{\partial \varphi_1} = 2T\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}\sin \varphi_1 \quad (7.4)$$

$$\dot{n}_2 = \frac{\partial H}{\partial \varphi_2} = 2T\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}\sin \varphi_2 \quad (7.5)$$

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_1 &= -\frac{\partial H}{\partial n_1} = 2U(N - 2n_1 - n_2) - \frac{Tn_2\cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} \\ &+ \frac{T(N - 2n_1 - n_2)\cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} \end{aligned} \quad (7.6)$$

$$\begin{aligned} \dot{\varphi}_2 &= -\frac{\partial H}{\partial n_2} = 2U(N - n_1 - 2n_2) - \frac{Tn_1\cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} \\ &+ \frac{T(N - n_1 - 2n_2)\cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} . \end{aligned} \quad (7.7)$$

Obwohl diese rein klassische Dynamik lediglich einer sehr groben Näherung entspricht, kann sie doch – ähnlich wie im Fall des Doppelmuldenproblems (Abschnitt 4.3.2) – zum qualitativen Verständnis der komplexen Dynamik beitragen. In diesem Zusammenhang ist es von Interesse, den Phasenraum in Abhängigkeit der Systemparameter zu betrachten. Anders als im Zwei-Moden-Problem ist das System nicht mehr integrabel, so dass der Phasenraum je nach Wahl der Parameter durchaus gemischt sein kann, also aus regulären Inseln umgeben von chaotischen Gebieten besteht. Dies ist ausführlich in den Artikeln [122, 127] nachzulesen. Nach [122] sind folgende für diese Arbeit interessante Regime abzugrenzen:

- Orbits mit Anfangsbedingungen in der Nähe der Grundzustände zeigen reguläres Verhalten, und die Populationen n_i oszillieren periodisch.
- Orbits mit Anfangsbedingungen in der Nähe instabiler Fixpunkte verhalten sich im Allgemeinen chaotisch.

Für hinreichende Entfernungen von den Fixpunkten existieren ebenso regu-

läre Orbits. Diese Trajektorien für die n_i sind im Phasenraum wohl separiert, so dass hier der Effekt des “Self-Trappings” auftritt.

In [122] werden zudem Anfangsbedingungen untersucht, zu denen eine Mulde praktisch leer ist und bleibt, die hier jedoch nicht weiter verfolgt werden. Zudem charakterisiert nach [122] der Wert des Parameters $\Lambda = NU/T$ den Charakter der Dynamik analog zum Doppelmuldensystem. Hier hängt die Existenz bestimmter Fixpunkte im Phasenraum von Λ ab, was die Art der Dynamik entscheidend beeinflusst. Die Abbildung 7.1 illustriert die Dynamiken der Populationen n_i in diversen Regimen mit je unterschiedlichen Anfangsauslenkungen. Die Graphiken 7.1a) und b) zeigen offensichtlich reguläre Dynamik im STR. Für das kleinere Λ in 7.1b) fällt der “Self-Trapping-Effekt” nicht ganz so stark aus. 7.1c) und 7.1d) bilden Dynamiken mit gleichem Λ und unterschiedlichen Anfangsbedingungen ab. Erkennbar findet ein Übergang statt: Für Anfangsbedingungen nahe am Grundzustand (7.1c)) ist die Dynamik regulär, für größere anfängliche Auslenkungen wird sie chaotisch (7.1d)) (s.o.). Den Graphiken 7.1e) und 7.1f) liegen bis auf die anfängliche Auslenkung die gleichen Parameter zugrunde wie der Abbildung 7.1a). Auch aus dieser Abbildung geht ein Abnehmen der Regularität hervor – es treten kleine Kollapse und Revivals auf, die nicht mehr so regelmäßig sind wie für kleineres Λ in Abbildung 7.1b).

Nach den Herausarbeitungen von Kapitel 4.3.2 ist die rein klassische Dynamik schon für den Fall des Doppelmuldensystems nicht in der Lage, die Dynamik der Populationen zu reproduzieren, von dem Sonderfall des Rabi-Regimes ($\Lambda \ll 1$) abgesehen. Dies stellt sich für das DTS ähnlich bzw. noch drastischer dar. Es zeigt sich, dass die rein klassische Dynamik (7.4) bis (7.7) die numerisch exakte im Allgemeinen auf nur sehr kleinen Zeitskalen richtig beschreibt. Allerdings reproduzieren die klassischen Gleichungen die korrekten Oszillationsfrequenzen für diejenigen Bereiche, in denen die Drei-Topf-Dynamik ein hohes Maß an Regularität aufweist. Für größere Werte von Λ und stärkere Auslenkungen δ hingegen versagt die rein klassische Dynamik genau wie im Doppelmuldensystem. Insbesondere für sehr große Auslenkungen mit der von ihnen induzierten chaotischen Dynamik können die klassischen Bewegungsgleichungen keine sinnvollen Aussagen über die Quantendynamik der Populationen treffen. Trotzdem ist die große Bedeutung der klassischen Bewegungsgleichungen nicht von der Hand zu weisen. Nicht nur führen die Untersuchungen der Phasenräume und Fixpunkte auf ihrer Basis zu qualitativen Erkenntnissen [124, 122, 127], sie dienen auch als Ausgangspunkt semiklassischer Untersuchungen, unter anderem von TWA und semiklassischen Propagationen.

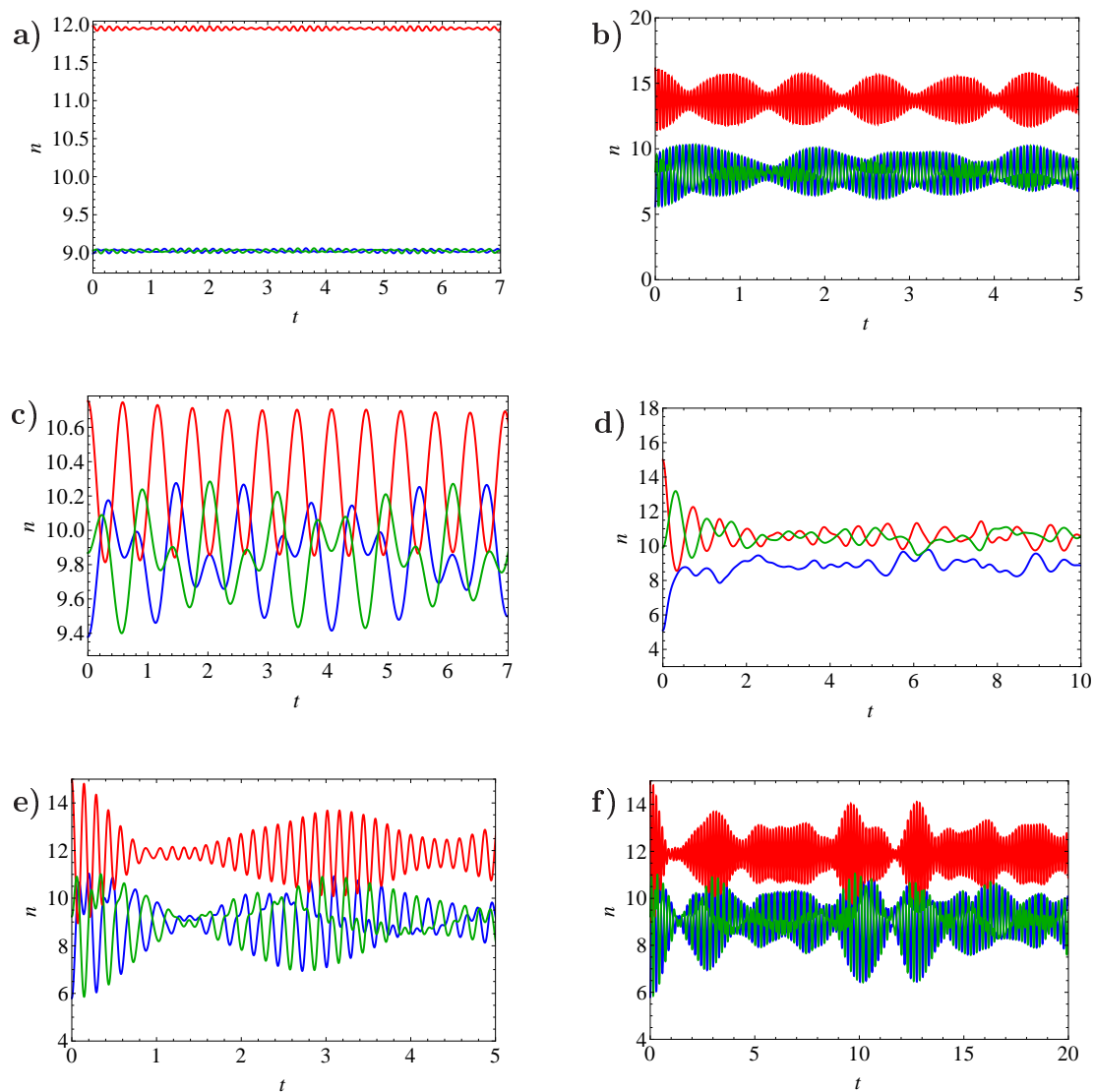


Abbildung 7.1: Numerisch exakte Ergebnisse für die Dynamik der Populationen n_1 (grün), n_2 (blau) und n_3 (rot) im DTS im Rahmen der Drei-Moden-Näherung für $N = 30$ und verschiedene Tunnelraten, Wechselwirkungsstärken und Anfangsauslenkungen:

a) $T = 10, U = 1, \delta = 0.1$, b) $T = 50, U = 1, \delta = 20$,

c) und d) $T = 1, U = 1, \delta = 1$ bzw. $\delta = 10$,

e) und f) $T = 10, U = 1, \delta = 10$ für zwei verschiedene Zeitfenster.

7.1.1 TWA im Drei-Topf-System

Da die klassischen Bewegungsgleichungen (7.4) bis (7.7) die Dynamik der ultrakalten Bosonen nicht hinreichend beschreiben können, soll im weiteren Verlauf der vorliegenden Arbeit die Dynamik im Rahmen der in Abschnitt 3.3 vorgestellten TWA diskutiert werden. Im Doppelmuldensystem erbrachte die TWA für jedes einzelne vorgestellte Regime gute Übereinstimmung mit der numerisch exakten Dynamik auf einer Zeitskala bis zum ersten Revival. Die Revivals selbst konnte sie jedoch nicht reproduzieren.

Das weitere Vorgehen erfolgt im Prinzip analog zu Abschnitt 6.1: Der Quantencharakter der zu propagierenden Wellenfunktion wird durch das Sampeln einer großen Anzahl von Anfangsbedingungen reproduziert. Diese werden so ausgewählt, dass deren Verteilung der Wignerfunktion der anfänglichen Wellenfunktion entspricht. Der einzige Unterschied zum Doppelmuldensystem liegt in der höheren Dimension des Phasenraums (hier 4). Folglich ist eine größere Anzahl von Trajektorien (hier 10^4) zu propagieren, um die Konvergenz der Dynamik zu erreichen. Die Wigner-Verteilung folgt der klassischen Liouvillegleichung

$$\frac{\partial}{\partial t} W(\varphi_1, \varphi_2, n_1, n_2) = \{H(\varphi_1, \varphi_2, n_1, n_2), W(\varphi_1, \varphi_2, n_1, n_2)\} ,$$

und die einzelnen Trajektorien werden gemäß den klassischen Bewegungsgleichungen (7.4) bis (7.7) in der Zeit entwickelt. Sie werden zur Bestimmung von Erwartungswerten aufsummiert.

Die resultierenden Ergebnisse sollen im Anschluss an die folgende Vorstellung der Herman-Kluk-Propagation für das DTS diskutiert werden.

7.1.2 HK-Propagation im Drei-Topf-System

Nach den Abschnitten 5 und 6.2 ist zu erwarten, dass semiklassische Propagationen und Methoden in der Lage sein könnten, die exakte Quantendynamik im DTS zu beschreiben. Zur Propagation mit dem HK-Propagator wird entsprechend Abschnitt 6.2 verfahren. Auch in der Drei-Moden-Näherung ist der volle HK-Propagator (3.18) stark zu vereinfachen. Der einzige Unterschied zum Fall des Doppelminimums liegt in der Dimensionalität: Aus j und φ werden Vektoren der Dimension zwei im HK-Propagator (6.2). Deren Zeitabhängigkeit ist erneut durch die klassischen Bewegungsgleichungen (7.4) bis (7.7) gegeben. Analog zu Abschnitt 6.2 ist die Zeitentwicklung der Wirkung

$$\begin{aligned}\dot{S} &= \boldsymbol{\varphi} \dot{\mathbf{n}} - H(\boldsymbol{\varphi}, \mathbf{n}) = -U (n_1^2 + n_2^2 + (N - n_1 - n_2)^2) \\ &- 2T \sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)} \varphi_1 \sin \varphi_1 - 2T \sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)} \varphi_2 \sin \varphi_2 \\ &+ 2T \sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)} \cos \varphi_1 + 2T \sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)} \cos \varphi_2 .\end{aligned}$$

Weiterhin gelten für die Monodromiematrixelemente, die in den komplexen HK-Vorfaktor

$$R(\boldsymbol{\varphi}_i, \mathbf{n}_i, t) = \det \left[\frac{1}{2} \left(\mathbf{m}_{11} + \mathbf{m}_{22} - i\hbar\gamma \mathbf{m}_{21} - \frac{1}{i\hbar\gamma} \mathbf{m}_{12} \right) \right]^{1/2}$$

eingehen, folgende Differentialgleichungen

$$\begin{aligned}& \begin{pmatrix} \dot{m}_{11}^{\text{I}} & \dot{m}_{12}^{\text{I}} & \dot{m}_{11}^{\text{II}} & \dot{m}_{12}^{\text{II}} \\ \dot{m}_{21}^{\text{I}} & \dot{m}_{22}^{\text{I}} & \dot{m}_{21}^{\text{II}} & \dot{m}_{22}^{\text{II}} \\ \dot{m}_{11}^{\text{III}} & \dot{m}_{12}^{\text{III}} & \dot{m}_{11}^{\text{IV}} & \dot{m}_{12}^{\text{IV}} \\ \dot{m}_{21}^{\text{III}} & \dot{m}_{22}^{\text{III}} & \dot{m}_{21}^{\text{IV}} & \dot{m}_{22}^{\text{IV}} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial \varphi_1} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial \varphi_2} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_1^2} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial n_2} \\ -\frac{\partial H^2}{\partial n_2 \partial \varphi_1} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_2 \partial \varphi_2} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial n_1} & -\frac{\partial H^2}{\partial n_2^2} \\ \frac{\partial H^2}{\partial \varphi_1^2} & \frac{\partial H^2}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_2} & \frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial \varphi_1} & \frac{\partial H^2}{\partial n_2 \partial \varphi_1} \\ \frac{\partial H^2}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_2} & \frac{\partial H^2}{\partial \varphi_2^2} & \frac{\partial H^2}{\partial n_1 \partial \varphi_2} & \frac{\partial H^2}{\partial n_2 \partial \varphi_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_{11}^{\text{I}} & m_{12}^{\text{I}} & m_{11}^{\text{II}} & m_{12}^{\text{II}} \\ m_{21}^{\text{I}} & m_{22}^{\text{I}} & m_{21}^{\text{II}} & m_{22}^{\text{II}} \\ m_{11}^{\text{III}} & m_{12}^{\text{III}} & m_{11}^{\text{IV}} & m_{12}^{\text{IV}} \\ m_{21}^{\text{III}} & m_{22}^{\text{III}} & m_{21}^{\text{IV}} & m_{22}^{\text{IV}} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (7.8)$$

die analog zu Kapitel 6.2 mit dem Runge-Kutta-Verfahren numerisch zu lösen sind. Der explizite komplette Satz dieser Differentialgleichungen ist im Anhang C zu finden. Ebenfalls genau wie in 6.2 wird der Realteil des Überlapps $\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle$ gesampelt, und anschließend eine Monte-Carlo-Integration zur Lösung des Integrals im HK-Propagator (3.14) durchgeführt. Die resultierenden Ergebnisse werden im folgenden Abschnitt vorgestellt.

7.2 Vergleich der Ergebnisse

Um nun die mithilfe der TWA und der HK-Propagation gewonnenen Ergebnisse bewerten zu können, werden sie in Abbildung 7.2 für eine Dynamik der Population im “ersten” Potentialtopf im Vergleich zum numerisch exakten Ergebnis dargestellt. Die Systemparameter wurden wie in Abbildung 7.1e) und 7.1f) gewählt, in der die resultierenden exakten Ergebnisse wahre Quantencharakteristika wie Kollapse und Revivals aufweisen.

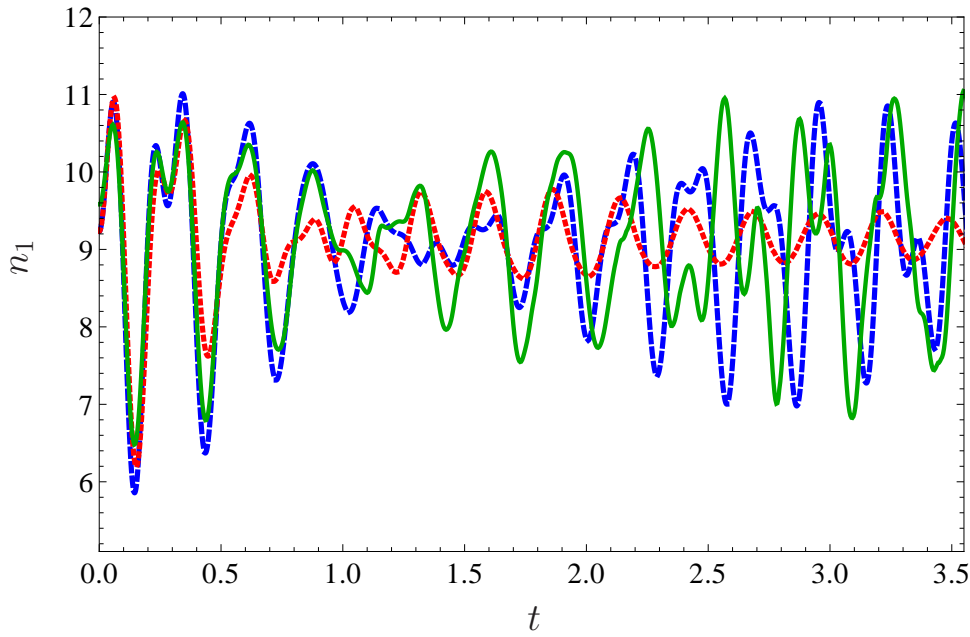


Abbildung 7.2: Vergleich numerisch exakter Ergebnisse (blau gestrichelt) mit HK-Propagation (grün durchgezogen) und TWA (rot gepunktet) für die Dynamik der Population n_1 im DTS im Rahmen der Drei-Moden-Näherung für $N = 30$, $T = 10$, $U = 1$ und $\delta = 10$. Zur Erzeugung der semiklassischen Daten wurden 2×10^4 Trajektorien propagiert.

Auf Basis der Abbildung sind diverse Aussagen zu treffen. Zum ersten wird ersichtlich, dass weder die TWA noch die semiklassische HK-Propagation in der Lage sind, die numerisch exakte Dynamik auf einer großen Zeitskala korrekt wiederzugeben. Besonders die TWA reproduziert lediglich die ersten beiden Oszillationen der Population, und das Signal zerfällt rasch im Anschluss. Die HK-Resultate folgen hingegen den numerisch exakten für ca. vier Oszillationen und stellen schon dadurch eine deutliche Verbesserung gegenüber der TWA dar. Vor allem verhält es sich hier ähnlich wie im Fall des Doppelmuldensystems: Nach dem Zerfall des Signals ist die TWA nicht mehr in der Lage, Revivals zu liefern, so dass sich ihre

Dynamik spätestens nach dem ersten Zerfall, der in der Abbildung 7.2 schon nach drei Oszillationsperioden eintritt, als unbrauchbar erweist. Die mithilfe des HK-Propagators und damit unter Berücksichtigung der quantenmechanischen Phasen erzeugten semiklassischen Ergebnisse hingegen beschreiben ähnlich wie die exakten ein Revival, dessen Einhüllende der der exakten Numerik entspricht. Die Oszillationen sind zwar zwischenzeitlich phasenverschoben, scheinen sich aber ab einem gewissen Zeitpunkt ($t \approx 3.5$ in Abbildung 7.2) dem exakten Verlauf wieder anzunähern.

Das Versagen der TWA ist auf die komplexe Struktur des Phasenraums zurückzuführen. Je kleiner Λ und je kleiner die Anfangsauslenkungen, desto regulärer ist der Phasenraumbereich, in dem die Dynamik stattfindet, so dass für diese Werte die TWA zur Beschreibung der Dynamik in Betracht kommt. Für wachsendes Λ werden die chaotischen Anteile im Phasenraum größer [122], und damit die Bereiche, für die die TWA scheinbar keine sinnvollen Aussagen mehr machen kann. Weiterhin wurde im Theorieteil 3.3 bereits festgestellt, dass die TWA eine gute Näherung sein sollte für Systeme, in denen eine große Anzahl von Teilchen beteiligt ist, bzw. sogar exakt ist für $N \rightarrow \infty$. In der Abbildung 7.2 nun wurde ein System betrachtet, das aus lediglich 30 Atomen besteht. Dies ist offensichtlich keine sehr große Teilchenzahl, so dass noch zu untersuchen bleibt, ob die TWA bessere Ergebnisse für deutlich größere N liefern kann.

Als Ursachen für die Abweichungen der semiklassischen von der exakten Dynamik kommen drei Umstände in Betracht. Zum ersten besteht auch hier das Problem der kleinen Teilchenzahl. Da aber für die Semiklassik gerade ähnlich wie bei der TWA eine sehr große Anzahl an Teilchen vorausgesetzt wird, wäre eine Verbesserung der Ergebnisse mit wachsendem N denkbar.

Zweitens tritt auch hier das bereits im Zusammenhang mit dem Doppelminimum erwähnte Problem des endlichen Phasenraums in der Anzahl-Phasen-Darstellung in Erscheinung. Indem der Phasenraum für das DTS unter anderem aus chaotischen Bereichen besteht, gelangen auch Trajektorien, die anfänglich im Zentrum des Phasenraums lokalisiert sind, schnell an dessen Rand. Wie bereits ausgeführt (Kapitel 6.2), sind solche Beiträge zu verwerfen, da die zugehörigen kohärenten Zustände durch die Phasenraumgrenze abgeschnitten werden und somit nicht adäquat zur Dynamik beitragen. Besonders für großes Λ und starke anfängliche Auslenkungen wird die Anzahl dieser Trajektorien so umfangreich, dass das Wellenpaket nicht mehr sinnvoll darzustellen ist. Insofern wäre es interessant zu klären, ob ein Wechsel in eine Ort- und Impuls-Darstellung eine Verbesserung der semiklassischen Ergebnisse mit sich bringen würde.

Das dritte und wahrscheinlich bedeutendste Hindernis erklärt sich ebenfalls als Folge der chaotischen Bereiche im Phasenraum. Wie bereits in Theorieabschnitt 3.2.2 dargelegt, entspricht der HK-Vorfaktor einem Maß für die Stabilität der ein-

zeln zu propagierenden Trajektorien. Je kleiner die Stabilität, desto größer fällt der Betrag des Vorfaktors aus. In der Folge werden die Beiträge gerade der chaotischen Trajektorien, die ja eine geringe Stabilität aufweisen, mit der Zeit exponentiell groß [128]: Sie wachsen mit dem Lyapunov-Exponenten [129]. In der Praxis sind solche Trajektorien daran zu erkennen, dass die Norm der zu ihnen gehörenden kohärenten Zustände mit der Zeit immens groß wird, obwohl die Norm der korrekt beitragenden semiklassischen Wellenfunktionen sich mehr oder weniger bei eins bewegen sollte [130]. Somit vermögen schon wenige hoch instabile Trajektorien den gesamten Ausdruck im Integral des HK-Propagators zu dominieren, was zu ernstlichen Fehlern in den semiklassischen Ergebnissen und zu schlechter Konvergenz führen kann.

Die Abbildung 7.3 zeigt das über n_2 gemittelte Betragsquadrat

$$P(n_1) = \int dn_2 |\psi(n_1, n_2)|^2$$

der exakten Wellenfunktion und das der semiklassischen in der n_1 -Basis zu der in 7.2 gezeigten reduzierten Dynamik. Hier ist deutlich der erwähnte Effekt der wachsenden Norm zu erkennen. Die semiklassische Wellenfunktion folgt der exakten relativ genau bis zum Kollaps. Für größere Zeiten läuft sie dann jedoch in der n_1 -Basis auseinander, und anhand der Farbkodierung ist die stark wachsende Norm zu erkennen, die letztlich für die Verfälschung der Ergebnisse verantwortlich ist. Wie in [128] diskutiert, lassen sich die semiklassischen Ergebnisse mit wachsender Anzahl propagierter Trajektorien verbessern, indem die Beiträge der hoch chaotischen Trajektorien in der Lage sind, sich gegenseitig auszulöschen. Andererseits steigt parallel auch der damit verbundene Rechenaufwand.

Zur Umgehung des Problems und somit zur Verbesserung der Resultate lassen sich mit zu großer Norm beitragende Trajektorien im Prinzip selbstverständlich aussortieren [128], was aber gleichzeitig dazu führt, dass die Wellenfunktion nicht mehr komplett repräsentiert wird. Dieser Ansatz ist also nur unter der Voraussetzung sinnvoll, dass noch genug Trajektorien zur hinreichenden Darstellung der Gesamtwellenfunktion verbleiben und der auf das Aussortieren zurückzuführende Fehler zu vernachlässigen ist. Dies sollte der Fall sein, solange sich der Anteil der verworfenen Trajektorien im einstelligen Prozentbereich bewegt [128]. Für die Abbildungen 7.2 und 7.3 wurden bereits ca. fünf Prozent der Trajektorien aussortiert, so dass diese Anzahl kaum noch zu vergrößern ist, möchte man die Wellenfunktion noch hinreichend darstellen können.

Dass die schlechte Übereinstimmung der semiklassischen mit der exakten Dynamik auf die chaotischen Bereiche im Phasenraum zurückzuführen ist, geht auch aus Abbildung 7.4 im Vergleich zu 7.2 hervor. Abgesehen von einer größeren anfänglichen Auslenkung $\delta = 20$ zeigt Abbildung 7.4 für dieselben Parameter wie in

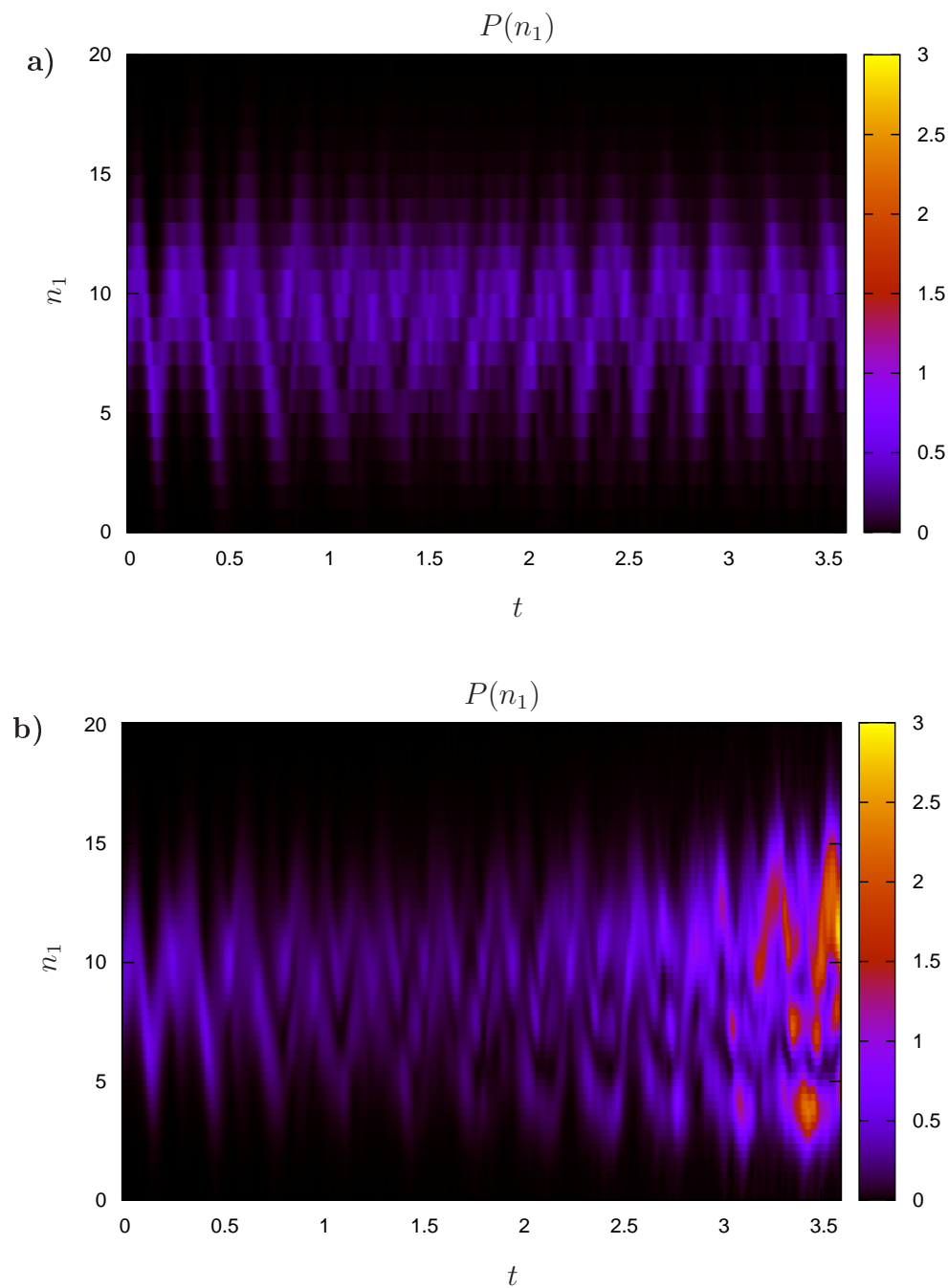


Abbildung 7.3: Dynamik der Wellenfunktion der ultrakalten Bosonen im n_1 -Raum für das DTS im Rahmen der Drei-Moden-Näherung a) numerisch exakt und b) mithilfe des HK-Propagators für 10^4 ausgewürfelte Trajektorien berechnet für jeweils $N = 30$, $T = 10$, $U = 1$ und $\delta = 10$.

Abbildung 7.2 eine Gegenüberstellung der exakten, der aus der TWA resultierenden und der semiklassischen reduzierten Dynamik. Nachdem die Dynamik umso irregulärer wird, je größer die anfängliche Auslenkung und somit die Energiedifferenz zum Grundzustand ist, gelangen immer mehr der gesampelten Trajektorien in die chaotischen Gebiete im Phasenraum. In der Folge waren zur Bestimmung der semiklassischen Wellenfunktion ca. 50 Prozent der Trajektorien zu verwerfen. Dass dies zu keinem guten Ergebnis führen kann, ist offensichtlich und in Abbildung 7.4 zu sehen: Die semiklassische beschreibt die exakte Dynamik annähernd ebenso schlecht wie die TWA.

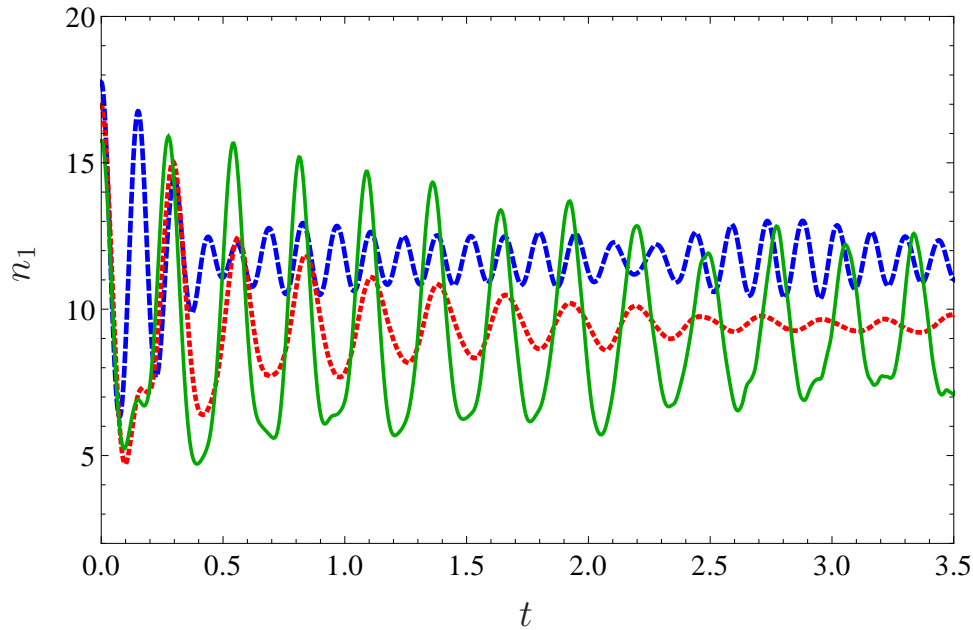


Abbildung 7.4: Vergleich numerisch exakter Ergebnisse (blau gestrichelt) mit HK-Propagation (grün durchgezogen) und TWA (rot gepunktet) für die Dynamik der Population n_1 im DTS im Rahmen der Drei-Moden-Näherung für $N = 30$, $T = 10$, $U = 1$ und $\delta = 20$. Zur Erzeugung der semiklassischen Daten wurden 2×10^4 Trajektorien propagiert.

Da die Ausdehnung der chaotischen Bereiche im Phasenraum mit Λ wächst, sollte die HK-Propagation für kleine Werte von Λ im Prinzip gut sein. Zur Überprüfung dieser Annahme könnte also im nächsten Schritt für solch kleine Λ zu der oben genannten Ort-Impuls-Darstellung übergegangen und eine systematische semiklassische Untersuchung für deutlich größere Teilchenzahlen in Abhängigkeit der Anzahl der gesampelten Trajektorien durchgeführt werden.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Die vorliegende Arbeit ging der Frage nach, inwieweit sich semiklassische Methoden zur Anwendung auf Systeme ultrakalter wechselwirkender Bosonen eignen. Wenngleich die Gross-Pitaevskii-Gleichung bereits einen theoretischen Rahmen zur Beschreibung der Dynamik der Wellenfunktion ultrakalter Bosonen unter Vernachlässigung der Fluktuationen bietet, besteht doch nach wie vor Bedarf an theoretischen Werkzeugen, die in der Lage sind, den vollen N -Teilchenzustand zu erfassen, also über die Wellengleichung eines klassischen Feldes hinauszugehen. Dafür bietet sich die Semiklassik an, die auf den klassischen Ergebnissen aufbaut, sie aber um die Quantenphasen und damit Interferenzen erweitert.

Um die Eignung semiklassischer Methoden im Bereich der ultrakalten Bosonen zu analysieren, wurde als zentrales Modellsystem ein Bose-Einstein-Kondensat im Doppelminimum gewählt, welches bereits von der Heidelberger Gruppe um Professor Oberthaler experimentell realisiert werden konnte. Diese Anordnung ist aus dynamischer Sicht überaus ergiebig, da die Bosonen theoretisch eine interessante Dynamik in Form einer Sequenz aus Oszillationen, Kollapsen und Revivals durchlaufen. Der theoretische Rahmen der Zwei-Moden-Näherung bietet die Möglichkeit, die semiklassischen Ergebnisse mit numerisch exakten zu vergleichen.

Mithilfe der WKB-Quantisierung und des besonders aus der Molekülphysik bekannten Reflexionsprinzips konnte ein geschlossener analytischer Ausdruck für die Dynamik der Populationsdifferenz der Atome im Doppelmuldensystem hergeleitet werden. Vergleiche mit numerisch exakten Ergebnissen im Rahmen des Zwei-Moden-Modells bestätigten, dass die gefundene semiklassische Dynamik die exakte Dynamik für alle vorgestellten Parameterregime überraschend genau wiedergibt.

Die hergeleitete semiklassische Formel stellt eines der wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit dar. Auf ihrer Grundlage erst ließen sich die charakteristischen Eigenschaften der Zeitentwicklung der Populationen in den Potentialtöpfen in Abhängigkeit der relevanten Systemparameter diskutieren. Im weiteren waren aus ihr auch die analytischen Ausdrücke für die Plasmafrequenz $\tilde{\omega}_p$, die Kollapszeit T_{kollaps} und die Revivalzeit T_{rev} ausschließlich in Abhängigkeit der Wechselwirkungsstärke U , Teilchenzahl N , Tunnelrate T und Anfangsauslenkung der Bosonen zu entnehmen.

Die analytischen semiklassischen Ausdrücke gehen weit über die in der Literatur bekannten Ergebnisse hinaus, die lediglich den nahezu klassischen Fall hinreichend beschreiben können, in dem die Anzahl der involvierten Teilchen groß ist, und die Wechselwirkungsstärken im Verhältnis zu den Tunnelraten sehr klein sind. Solange die semiklassischen Korrekturterme in diesem Grenzfall gleich eins werden, stimmen die hier erarbeiteten Ausdrücke mit denen in der Literatur überein. Sobald aber das Verhältnis UN/T – wie in den Experimenten üblich – größer wird, gewinnen die Korrekturen an Bedeutung, so dass die aus der Literatur bekannten Formeln bei der Beschreibung der exakten Dynamik versagen. Im Gegensatz dazu erwiesen sich die semiklassischen Ausdrücke als nahezu exakt. Mit ihrer Hilfe ließ sich z.B. die im Experiment [68] gemessene Plasmafrequenz reproduzieren.

Auch zu den in der Literatur zum Teil beobachteten Abhängigkeiten der Revivalzeit ließen sich Aussagen treffen. Die semiklassische Betrachtung konnte herausarbeiten, dass die dort hergeleiteten Ergebnisse nur für konkrete Spezialfälle gelten und die daraus abgeleiteten Verallgemeinerungen unzutreffend sind. Zu hoffen bleibt, dass Größen wie die Kollaps- und Revivalzeiten in der näheren Zukunft ebenfalls experimentelle Bestätigung finden.

Der mächtige analytische semiklassische Ausdruck bot zudem qualitative Einblicke in den Ursprung weiterer Charakteristika der Dynamik ultrakalter Bosonen in der Zwei-Moden-Näherung. Mit seiner Hilfe ließ sich auch die Herkunft der kleinen Drittelrevivals klären, die bis auf den absoluten Betrag reproduziert werden konnten. Die Anwendung semiklassischer Methoden auf ultrakalte Bosonensysteme erweist sich also in Bezug auf die Beantwortung aktueller Fragestellungen als vielversprechend.

Zu den genannten analytischen Betrachtungen trat in Kapitel 6 als weiterer Schwerpunkt dieser Arbeit die Herman-Kluk-Propagation. Deren Ergebnisse waren nun zu vergleichen mit den numerisch exakten, den rein klassischen, im Rahmen der Gross-Pitaevskii-Theorie gewonnenen, und den aus der “Truncated Wigner Approximation” resultierenden. Nach der vorliegenden Literatur können die klassischen Gleichungen die exakte Dynamik der Bosonen nicht hinreichend beschreiben, obwohl sie qualitativen Aufschluss über den Zusammenhang zwischen den Systemparametern und der Art der auftretenden Dynamik geben. Ein Fortschritt war mit dem Einsatz der TWA zu verzeichnen, die die Dynamik zumindest auf der Zeitskala des ersten Kollapses beschreiben konnte. Die als typische Quanteneigenschaften geltenden Revivals lassen sich mit der TWA hingegen nicht erzeugen, da zwar ein ganzes Ensemble von Trajektorien betrachtet wird, deren Interferenzeffekte aber keine Berücksichtigung finden. Diese Lücke nun konnte die HK-Propagation schließen: Da sie neben den einzelnen Trajektorien auch deren quantenmechanische Phasen mit einbezieht, die für die Quanteninterferenzen verantwortlich sind, waren mit ihrer Hilfe alle Charakteristika der exakten Dynamik zu reproduzieren, im Besonderen auch die Revivals.

Im Fokus von Kapitel 7 stand dann noch die theoretische Beschreibung der Zeitentwicklung ultrakalter Bosonen in einem Potentialsystem aus drei Töpfen. Diese Dynamik erweist sich aufgrund der Nichtintegrabilität des Systems als sogar noch facettenreicher als die im Doppelminimum. In der Gegenüberstellung von exakter Numerik, rein klassischer Dynamik, TWA und semiklassischer Herman-Kluk-Propagation kristallisierten sich wichtige Sachverhalte heraus. Im Ergebnis beschreibt das semiklassische Verfahren die exakte Dynamik zwar besser als die beiden anderen Methoden, bleibt in seiner Überlegenheit allerdings auf relativ kleine Zeitskalen beschränkt, was auf die chaotischen Bereiche im Phasenraum zurückzuführen ist. Weiterhin stellte sich die Endlichkeit des Phasenraums in der Anzahl-Phasen-Darstellung als ein Problem heraus. Aufgrund der chaotischen Bereiche gelangen die zu propagierenden Trajektorien schnell an den Rand des Phasenraums, so dass deren Beiträge verworfen werden müssen.

In der Weiterführung dieser Arbeit wäre es somit von großem Interesse zu eruieren, ob eine Verbesserung der Ergebnisse mit einem Wechsel von der Anzahl-Phasen-Basis in eine Ort- und Impuls-Darstellung zu erzielen wäre. In dieser ist der Phasenraum nicht endlich und entsprechend die Anzahl der zu verwerfenden Trajektorien unter Umständen nicht so groß. Auf diesem Weg ließen sich die Resultate der semiklassischen Propagation womöglich entscheidend verbessern.

Die vorliegende Arbeit konnte zeigen, dass sich semiklassische Methoden hervorragend dazu eignen, die hinzugezogenen Modellsysteme wechselwirkender ultrakalter Bosonen theoretisch zu beschreiben. Besonders für das integrable Doppelmulden-system erzielte die Semiklassik beachtlich gute Ergebnisse. Inwieweit die Methoden auch für andere Systeme heranzuziehen sind bleibt weiterer Forschung vorbehalten. Auch die Beschreibung der stark wechselwirkenden Nichtgleichgewichts-Modellen innewohnenden Dynamik, bei denen sich wenige Bosonen in einem Gitter aus Potentialtöpfen bewegen, bedarf noch theoretischer Werkzeuge. Denkbar wäre die Anwendung des HK-Propagators auf ein ausgedehntes Gitter von Bosonen.

Zu wünschen bleibt eine semiklassische Propagation allgemeiner voller N -Bosonen-Zustände in beliebigen Potentialen. Die hier vorgestellte Propagation konnte sich auf zwei bzw. drei beteiligte Moden beschränken, indem spezielle Fallengeometrien gewählt wurden. Die zugrunde liegende klassische Dynamik bestand daher aus lediglich zwei bzw. vier gekoppelten Bewegungsgleichungen für die Populationen und deren Phasen, mit denen die semiklassische Propagation gespeist wurde. Zur Behandlung eines echten Vielmodenproblems müsste der bereits vorgestellte Herman-Kluk-Propagator für das ganze Feld ausgewertet und die Gross-Pitaevskii-Gleichung herangezogen werden, um den Beitrag der "klassischen" Dynamik beizustellen. Die Rolle von Ort und Impuls würde hier die Wellenfunktion selber und ihr komplex Konjugiertes übernehmen. Vorbedingung der Betrachtung eines vollständigen Feldes wären allerdings analytische Vereinfachungen des komplexen

Herman-Kluk-Vorfaktors, da dieser die Determinante einer Matrix enthält, deren Dimension derjenigen des Systems entspricht. Die theoretische Auseinandersetzung mit dem semiklassischen Vorfaktor bietet mithin einen Ausgangspunkt für weitere Forschung.

Literaturverzeichnis

- [1] M. Rigol, V. Dunjko und M. Olshanii. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, **452**, 854, 2008.
- [2] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva und Mukund Vengalattore. Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems. *Phys. Mod. Phys.*, **83**, 863, 2011.
- [3] A. Flesch, M. Cramer, I. P. McCulloch, U. Schollwöck und J. Eisert. Probing local relaxation of cold atoms in optical superlattices. *Phys. Rev. A*, **78**, 033608, 2008.
- [4] M. Albiez, R. Gati, J. Fölling, S. Hunsmann, M. Cristiani und M. K. Oberthaler. Direct Observation of Tunneling and Nonlinear Self-Trapping in a Single Bosonic Josephson Junction. *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 010402, 2005.
- [5] T. Kinoshita, T. Wenger und D. S. Weiss. A quantum Newton's cradle. *Nature*, **440**, 900, 2006.
- [6] S. Hofferberth, I. Lesanovsky, B. Fischer, T. Schumm und J. Schmiedmayer. Nonequilibrium coherence dynamics in one-dimensional Bose gases. *Nature*, **449**, 324, 2007.
- [7] M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Observation of Bose-Einstein Condensation in a Dilute Atomic Vapor. *Science*, **269**, 198, 1995.
- [8] A. Einstein. Quantentheorie des einatomigen idealen Gases. *Sitzungsbericht der Preussischen Akademie der Wissenschaft*, Seite 261, 1924.
- [9] S. N. Bose. Plancks Law and Light Quantum Hypothesis. *Zeitschrift für Physik*, **26**, 178, 1924.
- [10] K. B. Davis, M. O. Mewes, M. R. Andrews, N. J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Bose-Einstein Condensation in a Gas of Sodium Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 3969, 1995.
- [11] C. C. Bradley, C. A. Sackett, J. J. Tollett und R. G. Hulet. Evidence of Bose-Einstein Condensation in an Atomic Gas with Attractive Interactions. *Phys. Rev. Lett.*, **75**, 1687, 1995.
- [12] J. A. Sauer, M. D. Barrett und M.S. Chapman. Storage Ring for Neutral Atoms. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 270401, 2001.

-
- [13] W. H. Heathcote, S. Nugent, B. T. Sheard und C. J. Foot. A ring trap for ultracold atoms in an RF-dressed state. *New J. Phys.*, **10**, 043012, 2008.
 - [14] C. J. Pethick und H. Smith. *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. Cambridge University Press, 2001.
 - [15] J. R. Abo-Shaeer, C. Raman, J. M. Vogels und W. Ketterle. Observation of Vortex Lattices in Bose-Einstein Condensates. *Science*, **292**, 476, 2001.
 - [16] J. Denschlag, J. E. Simsarian, D. L. Feder, Charles W. Clark, L. A. Collins, J. Cubizolles, L. Deng, E. W. Hagley, K. Helmerson, W. P. Reinhardt, S. L. Rolston, B. I. Schneider und W. D. Phillips. Generating Solitons by Phase Engineering of a Bose-Einstein Condensate. *Science*, **287**, 97, 2000.
 - [17] S. Burger, K. Bongs, S. Dettmer, W. Ertmer, K. Sengstock, A. Sanpera, G. V. Shlyapnikov und M. Lewenstein. Dark Solitons in Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **83**, 5198, 1999.
 - [18] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clement, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer und A. Aspect. Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature*, **453**, 891, 2008.
 - [19] M. R. Andrews, C. G. Townsend, H. J. Miesner, D. S. Durfee, D. M. Kurn und W. Ketterle. Observation of interference between two bose condensates. *Science*, **275**, 637, 1997.
 - [20] D. S. Hall, M. R. Matthews, C. E. Wieman und E. A. Cornell. Measurements of Relative Phase in Two-Component Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **81**, 1543, 1998.
 - [21] R. Gati, J. Estève, B. Hemmerling, T. B. Ottenstein, J. Appmeier, A. Weller und M. K. Oberthaler. A primary noise thermometer for ultracold Bose gases. *New J. Phys.*, **8**, 189, 2006.
 - [22] I. Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nat. Phys.*, **1**, 23, 2005.
 - [23] D. Jaksch und P. Zoller. The cold atom Hubbard toolbox. *Ann. Phys.*, **315**, 52, 2005.
 - [24] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger, B. Damski, A. Sen(De) und U. Sen. Ultracold atomic gases in optical lattices: mimicking condensed matter physics and beyond. *Adv. Phys.*, **56**, 243, 2007.
 - [25] I. Bloch, J. Dalibard und W. Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Rev. Mod. Phys.*, **80**, 885, 2008.
 - [26] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch und I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, **415**, 39, 2002.

-
- [27] M. Cramer, C. M. Dawson, J. Eisert und T. J. Osborne. Exact Relaxation in a Class of Nonequilibrium Quantum Lattice Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **100**, 030602, 2008.
 - [28] C. Gogolin, M. P. Müller und J. Eisert. Absence of Thermalization in Non-integrable Systems. *Phys. Rev. Lett.*, **106**, 040401, 2011.
 - [29] S. Trotzky, Y.-A. Chen, A. Flesch, I. P. McCulloch, U. Schollwöck und J. Eisert. Probing the relaxation towards equilibrium in an isolated strongly correlated one-dimensional Bose gas. *Nat. Phys.*, **8**, 325, 2012.
 - [30] T. Zibold, E. Nicklas, C. Gross und M. K. Oberthaler. Classical Bifurcation at the Transition from Rabi to Josephson Dynamics. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 204101, 2010.
 - [31] L. Simon und W. T. Strunz. Analytical results for Josephson dynamics of ultracold bosons. *Phys. Rev. A*, **86**, 053625, 2012.
 - [32] http://cua.mit.edu/ketterle_group/Nice_pics.htm.
 - [33] F. Dalfovo, S. Giorgini, L. P. Pitaevskii und S. Stringari. Theory of Bose-Einstein Condensation in Trapped Gases. *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 463, 1999.
 - [34] M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein und D. S. Fisher. Boson localization and the superfluid-insulator transition. *Phys. Rev. B*, **40**, 546, 1989.
 - [35] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch und I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, **415**, 39, 2002.
 - [36] T. Stöferle, H. Moritz, C. Schori, M. Köhl und T. Esslinger. Transition from a Strongly Interacting 1D Superfluid to a Mott Insulator. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 130403, 2004.
 - [37] E. P. Gross. Structure of a quantized vortex in boson systems. *Nuovo Cimento*, **20**, 454, 1961.
 - [38] E. P. Gross. Hydrodynamics of a superfluid condensate. *J. Math. Phys.*, **4**, 195, 1963.
 - [39] L. P. Pitaevskii. Vortex lines in an imperfect Bose gas. *Soviet Phys. JETP*, **13**, 451, 1961.
 - [40] M. J. Steel, M. K. Olsen, L. I. Plimak, P. D. Drummond, S. M. Tan, M. J. Collett, D. F. Walls und R. Graham. Dynamical quantum noise in trapped Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **58**, 4824, 1998.
 - [41] A. Sinatra, Carlos Lobo und Y. Castin. The truncated Wigner method for Bose-condensed gases: limits of validity and applications. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **35**, 3599, 2002.

- [42] P. B. Blakie, A. S. Bradley, M. J. Davis, R. J. Ballagh und C. W. Gardiner. Dynamics and statistical mechanics of ultra-cold Bose gases using c-field techniques. *Adv. Phys.*, **57**, 363, 2008.
- [43] E. Wigner. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium. *Phys. Rev.*, **40**, 749, 1932.
- [44] W. P. Schleich. *Quantum Optics in Phase Space*. Wiley-VCH, 2001.
- [45] P. A. Braun. Discrete semiclassical methods in the theory of Rydberg atoms in external fields. *Rev. Mod. Phys.*, **65**, 115, 1993.
- [46] N. Bohr. On the Constitution of Atoms and Molecules. *Phil. Mag.*, **26**, 476, 1913.
- [47] E. Rutherford. The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom. *Phil. Mag.*, **6**, 21, 1911.
- [48] A. Sommerfeld. Zur Quantentheorie der Spectrallinien (I + II). *Ann. Phys.*, **51**, 1, 1916.
- [49] G. Wentzel. Eine Verallgemeinerung der Quantenbedingung für die Zwecke der Wellenmechanik. *Z. Phys.*, **38**, 518, 1926.
- [50] H. A. Kramers. Wellenmechanik und halbzahlige Quantisierung. *Z. Phys.*, **39**, 828, 1926.
- [51] L. Brillouin. La mécanique ondulatoire de Schrödinger; une méthode générale de resolution par approximations successives. *Compt. Rend.*, **183**, 24, 1926.
- [52] M. Brack und R. K. Bhaduri. *Semiclassical physics*. Frontiers in physics. Addison-Wesley, Advanced Book Program, 1997.
- [53] M. Brack. Einführung in semiklassische Methoden. <http://homepages.uni-regensburg.de/~brm04014/notes/semicl.html>, 2004. Vorlesungsskript aus dem Wintersemester 02/03 an der Universität Regensburg.
- [54] D. J. Tannor. *Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective*. University Science Books, 2007.
- [55] F. Großmann. *Theoretical Femtosecond Physics: Atoms and Molecules in Strong Laser Fields*. Springer Series on Atomic, Optical, and Plasma Physics. Springer, 2008.
- [56] J. H. van Vleck. The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics. *Proc. Acad. Nat. Sci. USA*, **14**, 178, 1928.
- [57] M. C. Gutzwiller. Phase-Integral Approximation in Momentum Space and the Bound States of an Atom. *J. Math. Phys.*, **8**, 1979, 1967.
- [58] S. Levit und U. Smilansky. A new approach to gaussian path integrals and the evaluation of the semiclassical propagator. *Ann. Phys. (NY)*, **103**, 198, 1977.

-
- [59] R. P. Feynman. Space-Time Approach to Non-Relativistic Quantum Mechanics. *Rev. Mod. Phys.*, **20**, 367, 1948.
- [60] L. S. Schulman. *Techniques and applications of path integration*. Wiley-Interscience Publication. Wiley, 1981.
- [61] F. Grossmann und J. A. L. Xavier. From the coherent state path integral to a semiclassical initial value representation of the quantum mechanical propagator. *Phys. Lett. A*, **243**, 243, 1998.
- [62] M. F. Herman und E. Kluk. A semiclassical justification for the use of non-spreading wavepackets in dynamics calculations. *Chem. Phys.*, **91**, 27, 1984.
- [63] E. Kluk, M. F. Herman und H. L. Davis. Comparison of the propagation of semiclassical frozen Gaussian wave functions with quantum propagation for a highly excited anharmonic oscillator. *J. Chem. Phys.*, **84**, 326, 1986.
- [64] D. E. Knuth. *The art of computer programming, volume 2 (3rd ed.): semi-numerical algorithms*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., 1997.
- [65] M. K. Olsen und L. I. Plimak. Role of quantum statistics in the photoassociation of Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **68**, 031603, 2003.
- [66] M. K. Olsen. Quantum superchemistry: Role of trapping profile and quantum statistics. *Phys. Rev. A*, **69**, 013601, 2004.
- [67] S. L. W. Midgley, S. Wüster, M. K. Olsen, M. J. Davis und K. V. Kheruntsyan. Comparative study of dynamical simulation methods for the dissociation of molecular Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **79**, 053632, 2009.
- [68] R. Gati und M. K. Oberthaler. A bosonic Josephson junction. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **40**, R61, 2007.
- [69] B. D. Josephson. Possible new effects in superconductive tunnelling. *Physics Letters*, **1**, 251, 1962.
- [70] P. W. Anderson und J. M. Rowell. Probable Observation of the Josephson Superconducting Tunneling Effect. *Phys. Rev. Lett.*, **10**, 230, 1963.
- [71] K. K. Likharev. Superconducting weak links. *Rev. Mod. Phys.*, **51**, 101, 1979.
- [72] A. Barone und G. Paternò. *Physics and applications of the Josephson effect*. UMI books on demand. Wiley, 1982.
- [73] S. Pereverzev, A. Loshak, S. Backhaus, J. C. Davis und R. E. Packard. Quantum oscillations between two weakly coupled reservoirs of superfluid ^3He . *Nature*, **388**, 449, 1997.
- [74] J. C. Davis und R. E. Packard. Superfluid ^3He Josephson weak links. *Rev. Mod. Phys.*, **74**, 741, 2002.

-
- [75] S. Backhaus, S. Pereverzev, A. Loshak, J. C. Davis und R. E. Packard. Direct measurement of the current-phase relation of a superfluid $^3\text{He-B}$ weak link. *Science*, **278**, 1435, 1997.
- [76] K. Sukhatme, Y. Mukharsky, T. Chui und D. Pearson. Observation of the ideal Josephson effect in superfluid ^4He . *Nature*, **411**, 280, 2001.
- [77] J. Javanainen. Oscillatory exchange of atoms between traps containing Bose condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **57**, 3164, 1986.
- [78] B. P. Anderson und M. A. Kasevich. Macroscopic quantum interference from atomic tunnel arrays. *Science*, **282**, 1686, 1998.
- [79] F. S. Cataliotti, S. Burger, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi, A. Trombettoni, A. Smerzi und M. Inguscio. Josephson junction arrays with Bose-Einstein condensates. *Science*, **293**, 843, 2001.
- [80] S. Hofferberth, I. Lesanovsky, B. Fischer, J. Verdu und J. Schmiedmayer. Radio-frequency dressed state potentials for neutral atoms. *Nature Physics*, **2**, 710, 2006.
- [81] T. Schumm, S. Hofferberth, L. M. Andersson, S. Wildermuth, S. Groth, I. Bar-Joseph, J. Schmiedmayer und P. Krüger. Matter-wave interferometry in a double well on an atom chip. *Nature Physics*, **1**, 57, 2005.
- [82] S. Levy, E. Lahoud, I. Shomroni und J. Steinhauer. The a.c. and d.c. Josephson effects in a Bose-Einstein condensate. *Nature*, **449**, 579, 2007.
- [83] L. Simon und W. T. Strunz. Bose gas in a single-beam optical dipole trap. *Phys. Rev. A*, **81**, 063620, 2010.
- [84] K. Sakmann, A. I. Streltsov, O. E. Alon und L. S. Cederbaum. Exact Quantum Dynamics of a Bosonic Josephson Junction. *Phys. Rev. Lett.*, **103**, 220601, 2009.
- [85] A. I. Streltsov, O. E. Alon und L. S. Cederbaum. General variational many-body theory with complete self-consistency for trapped bosonic systems. *Phys. Rev. A*, **73**, 063626, 2006.
- [86] A. J. Ferris und M. J. Davis. Multimode analysis of non-classical correlations in double-well Bose-Einstein condensates. *New J. Phys.*, **12**, 055024, 2010.
- [87] D. Masiello, S. B. McKagan und W. P. Reinhardt. Multiconfigurational Hartree-Fock theory for identical bosons in a double well. *Phys. Rev. A*, **72**, 063624, 2005.
- [88] G. J. Milburn, J. Corney, E. M. Wright und D. F. Walls. Quantum dynamics of an atomic Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Phys. Rev. A*, **55**, 4318, 1997.
- [89] R. W. Spekkens und J. E. Sipe. Spatial fragmentation of a Bose-Einstein condensate in a double-well potential. *Phys. Rev. A*, **59**, 3868, 1999.

-
- [90] R. Franzosi, V. Penna und R. Zecchina. Quantum Dynamics of coupled Bosonic Wells within the Bose-Hubbard Picture. *Int. J. Mod. Phys. B*, **14**, 943, 2000.
- [91] J. R. Anglin und A. Vardi. Dynamics of a two-mode Bose-Einstein condensate beyond mean-field theory. *Phys. Rev. A*, **64**, 013605, 2001.
- [92] D. Ananikian und T. Bergeman. Gross-Pitaevskii equation for Bose particles in a double-well potential: Two-mode models and beyond. *Phys. Rev. A*, **73**, 013604, 2006.
- [93] A. P. Tonel, J. Links und A. Foerster. Behaviour of the energy gap in a model of Josephson coupled Bose-Einstein condensates. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **38**, 6879, 2005.
- [94] L. P. Pitaevskii und S. Stringari. *Bose-Einstein Condensation*. Oxford University Press, 2003.
- [95] A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi und S. R. Shenoy. Quantum Coherent Atomic Tunneling between Two Trapped Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **79**, 4950, 1997.
- [96] I. Zapata, F. Sols und A. J. Leggett. Josephson effect between trapped Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **57**, R28, 1998.
- [97] S. Raghavan, A. Smerzi, S. Fantoni und S. R. Shenoy. Coherent oscillations between two weakly coupled Bose-Einstein condensates: Josephson effects, π oscillations, and macroscopic quantum self-trapping. *Phys. Rev. A*, **59**, 620, 1999.
- [98] E. M. Graefe und H. J. Korsch. Semiclassical quantization of an N -particle Bose-Hubbard model. *Phys. Rev. A*, **76**, 032116, 2007.
- [99] G. S. Paraoanu, S. Kohler, F. Sols und A. Leggett. The Josephson plasmon as a Bogoliubov quasiparticle. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **34**, 4689, 2001.
- [100] A. J. Leggett. Bose-Einstein condensation in the alkali gases: Some fundamental concepts. *Rev. Mod. Phys.*, **73**, 307, 2001.
- [101] M. Holthaus und M. Stenholm. Coherent control of the self-trapping transition. *Eur. Phys. J. B*, **20**, 451, 2001.
- [102] A. Vardi und J. R. Anglin. Bose-Einstein Condensates beyond Mean Field Theory: Quantum Backreaction as Decoherence. *Phys. Rev. Lett.*, **86**, 568, 2001.
- [103] G. J. Krahn und D. H. J. O'Dell. Classical versus quantum dynamics of the atomic Josephson junction. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **42**, 205501, 2009.

-
- [104] J. Javanainen. Nonlinearity from quantum mechanics: Dynamically unstable Bose-Einstein condensate in a double-well trap. *Phys. Rev. A*, **81**, 051602, 2010.
 - [105] K. W. Mahmud, H. Perry und W. P. Reinhardt. Quantum phase-space picture of Bose-Einstein condensates in a double well. *Phys. Rev. A*, **71**, 023615, 2005.
 - [106] M. R. Hush, A. R. R. Carvalho und J. J. Hope. Number-phase Wigner representation for efficient stochastic simulations. *Phys. Rev. A*, **81**, 033852, 2010.
 - [107] V. S. Shchesnovich und V. V. Konotop. Nonlinear tunneling of Bose-Einstein condensates in an optical lattice: Signatures of quantum collapse and revival. *Phys. Rev. A*, **75**, 063628, 2007.
 - [108] V. S. Shchesnovich und V. V. Konotop. Nonlinear intraband tunneling of a Bose-Einstein condensate in a cubic three-dimensional lattice. *Phys. Rev. A*, **77**, 013614, 2008.
 - [109] F. Nissen und J. Keeling. Wentzel-Kramers-Brillouin approach and quantum corrections to classical dynamics in the Josephson problem. *Phys. Rev. A*, **81**, 063628, 2010.
 - [110] M. Chuchem, K. Smith-Mannschott, M. Hiller, T. Kottos, A. Vardi und D. Cohen. Quantum dynamics in the bosonic Josephson junction. *Phys. Rev. A*, **82**, 053617, 2010.
 - [111] K. Pawłowski, P. Ziń, K. Rzażewski und M. Trippenbach. Revivals in an attractive Bose-Einstein condensate in a double-well potential and their decoherence. *Phys. Rev. A*, **83**, 033606, 2011.
 - [112] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu und F. Laloë. *Quantenmechanik*. Bd. 1. De Gruyter, 2007.
 - [113] M. Abramowitz und I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, 1964.
 - [114] R. Schinke. *Photodissociation Dynamics: Spectroscopy and Fragmentation of Small Polyatomic Molecules*. Cambridge Monographs on Atomic, Molecular and Chemical Physics. Cambridge University Press, 1995.
 - [115] M. A. Pinsky. *Introduction to Fourier Analysis and Wavelets*. Graduate Studies in Mathematics. American Mathematical Society, 2002.
 - [116] R. Paredes und E. Neri. Quantum dynamics of a Bose gas in finite n-well potentials in one dimension. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **42**, 035301, 2009.
 - [117] Anatoli Polkovnikov. Evolution of the macroscopically entangled states in optical lattices. *Phys. Rev. A*, **68**, 033609, 2003.

-
- [118] L. Isella und J. Ruostekoski. Quantum dynamics in splitting a harmonically trapped Bose-Einstein condensate by an optical lattice: Truncated Wigner approximation. *Phys. Rev. A*, **74**, 063625, 2006.
- [119] C. V. Chianca und M. K. Olsen. Quantum phase-space analysis of population equilibration in multiwell ultracold atomic systems. *Phys. Rev. A*, **84**, 043636, 2011.
- [120] M. R. Hush, A. R. R. Carvalho und J. J. Hope. Number-phase Wigner representation for scalable stochastic simulations of controlled quantum systems. *Phys. Rev. A*, **85**, 023607, 2012.
- [121] C. Becker, P. Soltan-Panahi, J. Kronjäger, S. Dörscher, K. Bongs und K. Sengstock. Ultracold quantum gases in triangular optical lattices. *New J. Phys.*, **12**, 065025, 2010.
- [122] R. Franzosi und V. Penna. Chaotic behavior, collective modes, and self-trapping in the dynamics of three coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. E*, **67**, 046227, 2003.
- [123] K. Nemoto, C. A. Holmes, G. J. Milburn und W. J. Munro. Quantum dynamics of three coupled atomic Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **63**, 013604, 2000.
- [124] R. Franzosi und V. Penna. Self-trapping mechanisms in the dynamics of three coupled Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A*, **65**, 013601, 2001.
- [125] P. Pedri, L. Pitaevskii, S. Stringari, C. Fort, S. Burger, F. S. Cataliotti, P. Maddaloni, F. Minardi und M. Inguscio. Expansion of a Coherent Array of Bose-Einstein Condensates. *Phys. Rev. Lett.*, **87**, 220401, 2001.
- [126] Q. Thommen, J. C. Garreau und V. Zehnlé. Classical Chaos with Bose-Einstein Condensates in Tilted Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.*, **91**, 210405, 2003.
- [127] S. Mossmann und C. Jung. Semiclassical approach to Bose-Einstein condensates in a triple well potential. *Phys. Rev. A*, **74**, 033601, 2006.
- [128] K. G. Kay. Semiclassical propagation for multidimensional systems by an initial value method. *J. Chem. Phys.*, **101**, 2250, 1994.
- [129] H. D. Meyer. Theory of the Liapunov exponents of Hamiltonian systems and a numerical study on the transition from regular to irregular classical motion. *J. Chem. Phys.*, **84**, 3147, 1986.
- [130] K. G. Kay. Numerical study of semiclassical initial value methods for dynamics. *J. Chem. Phys.*, **100**, 4432, 1994.

Anhang

A Berechnung des Überlapps der kohärenten Zustände aus Kapitel 3.2.2

Zu berechnen ist der Überlapp der kohärenten Zustände $\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle$. Mithilfe deren Definition in Ortsdarstellung (3.13) aus Abschnitt 3.2.2 lässt sich schreiben

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle &= \int d\mathbf{r} \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \mathbf{z}_0 \rangle \\
 &= \left(\frac{\gamma_i}{\pi} \right)^{N/4} \left(\frac{\gamma_0}{\pi} \right)^{N/4} \int d\mathbf{r} \exp \left(-\frac{\gamma_i}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{q}_i)^2 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i (\mathbf{r} - \mathbf{q}_i) \right) \\
 &\times \exp \left(-\frac{\gamma_0}{2} (\mathbf{r} - \mathbf{q}_0)^2 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 (\mathbf{r} - \mathbf{q}_0) \right) \\
 &= \left(\frac{\gamma_i \gamma_0}{\pi^2} \right)^{N/4} \exp \left(\frac{i}{\hbar} (\mathbf{p}_i \mathbf{q}_i - \mathbf{p}_0 \mathbf{q}_0) - \frac{\gamma_i}{2} \mathbf{q}_i^2 - \frac{\gamma_0}{2} \mathbf{q}_0^2 \right) \\
 &\times \exp \left(\frac{1}{2(\gamma_i + \gamma_0)} \left(\gamma_i \mathbf{q}_i + \gamma_0 \mathbf{q}_0 - \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_i + \frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \right)^2 \right) \\
 &\times \underbrace{\int d\mathbf{q} \exp \left(-\frac{\gamma_i + \gamma_0}{2} (\mathbf{q} - \mathbf{c})^2 \right)}_{= \sqrt{\frac{2\pi}{\gamma_i + \gamma_0}}},
 \end{aligned}$$

wobei \mathbf{c} eine konstante Verschiebung darstellt. Nach einigem Umstellen und Sortieren nach Real- und Imaginärteil folgt

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle &= \left(\frac{4\gamma_i \gamma_0}{(\gamma_i + \gamma_0)^2} \right)^{N/4} \exp \left(-\frac{1}{2} \frac{\gamma_i \gamma_0}{(\gamma_i + \gamma_0)} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)^2 - \frac{1}{2(\gamma_i + \gamma_0)} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0)^2 \right) \\
 &\times \exp \left(\frac{i}{\hbar(\gamma_i + \gamma_0)} ((\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)(\gamma_0 \mathbf{p}_i + \gamma_i \mathbf{p}_0)) \right).
 \end{aligned}$$

Dies ist schließlich der allgemeinste Ausdruck für den Überlapp der kohärenten Zustände. Aus diesem folgt für den Spezialfall $\gamma_i = \gamma_0$ wieder der Ausdruck (3.15) aus Abschnitt 3.2.2

$$\langle \mathbf{z}_i | \mathbf{z}_0 \rangle = \exp \left(-\frac{\gamma}{4} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)^2 + \frac{i}{2\hbar} (\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_0)(\mathbf{p}_i + \mathbf{p}_0) - \frac{1}{4\gamma\hbar^2} (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_0)^2 \right) .$$

B Dynamik der Monodromiematrix im Doppelmuldensystem

Für die Zeitentwicklung der Elemente der Monodromiematrix (3.10) ergibt sich nach der Differentialgleichung (3.11) aus Abschnitt 3.2.2 im Doppelmuldensystem

$$\begin{aligned}
 \dot{m}_{11} &= -\frac{\partial^2 H}{\partial j \partial \varphi} m_{11} - \frac{\partial^2 H}{\partial j^2} m_{21} \\
 &= \frac{2Tj \sin \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} m_{11} \\
 &\quad - \left(4U + \frac{2T \cos \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} + \frac{2Tj^2 \cos \varphi}{((N+1)^2/4 - j^2)^{3/2}} \right) m_{21} \quad (8.1)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{m}_{12} &= -\frac{\partial^2 H}{\partial j \partial \varphi} m_{12} - \frac{\partial^2 H}{\partial j^2} m_{22} \\
 &= \frac{2Tj \sin \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} m_{12} \\
 &\quad - \left(4U + \frac{2T \cos \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} + \frac{2Tj^2 \cos \varphi}{((N+1)^2/4 - j^2)^{3/2}} \right) m_{22} \quad (8.2)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{m}_{21} &= \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi^2} m_{22} + \frac{\partial^2 H}{\partial j \partial \varphi} m_{21} \\
 &= 2T \sqrt{(N+1)^2/4 - j^2} \cos \varphi m_{11} - \frac{2Tj \sin \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} m_{21} \quad (8.3)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \dot{m}_{22} &= \frac{\partial^2 H}{\partial \varphi^2} m_{12} + \frac{\partial^2 H}{\partial j \partial \varphi} m_{22} \\
 &= 2T \sqrt{(N+1)^2/4 - j^2} \cos \varphi m_{12} - \frac{2Tj \sin \varphi}{\sqrt{(N+1)^2/4 - j^2}} m_{22} . \quad (8.4)
 \end{aligned}$$

Diese Gleichungen folgen unter Berücksichtigung der klassischen Hamiltonfunktion (4.9) für das Doppelmuldenproblem.

C Bewegungsgleichungen der Elemente der Monodromiematrix im Drei-Topf-System

Analog zu B ergibt sich für die Dynamik der Elemente der Monodromiematrix im Drei-Topf-System ein Satz gekoppelter Differentialgleichungen. Mit (7.8) folgt explizit

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{11}^I &= -\frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}}(N - 2n_1 - n_2) m_{11}^I + \frac{T \sin \varphi_2 n_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{21}^I \\
&- \left(\frac{2T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} + \frac{T \cos \varphi_1 (N - 2n_1 - n_2)^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 n_2^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{11}^{III} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{21}^{III} \\
\\
\dot{m}_{12}^I &= -\frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}}(N - 2n_1 - n_2) m_{12}^I + \frac{T \sin \varphi_2 n_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{22}^I \\
&- \left(\frac{2T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} + \frac{T \cos \varphi_1 (N - 2n_1 - n_2)^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 n_2^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{12}^{III} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{22}^{III}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{21}^{\text{I}} &= \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{11}^{\text{I}} - \frac{T \sin \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{21}^{\text{I}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{11}^{\text{III}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1 n_1^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + \frac{2T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{21}^{\text{III}} \\
\\
\dot{m}_{22}^{\text{I}} &= \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{12}^{\text{I}} - \frac{T \sin \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{22}^{\text{I}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{12}^{\text{III}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1 n_1^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + \frac{2T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{22}^{\text{III}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{11}^{\text{II}} &= -\frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}}(N - 2n_1 - n_2) m_{11}^{\text{II}} + \frac{T \sin \varphi_2 n_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{21}^{\text{II}} \\
&- \left(\frac{2T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} + \frac{T \cos \varphi_1 (N - 2n_1 - n_2)^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 n_2^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{11}^{\text{IV}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{21}^{\text{IV}} \\
\\
\dot{m}_{12}^{\text{II}} &= -\frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}}(N - 2n_1 - n_2) m_{12}^{\text{II}} + \frac{T \sin \varphi_2 n_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{22}^{\text{II}} \\
&- \left(\frac{2T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} + \frac{T \cos \varphi_1 (N - 2n_1 - n_2)^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 n_2^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{12}^{\text{IV}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{22}^{\text{IV}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{21}^{\text{II}} &= \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{11}^{\text{II}} - \frac{T \sin \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{21}^{\text{II}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{11}^{\text{IV}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1 n_1^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + \frac{2T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{21}^{\text{IV}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{22}^{\text{II}} &= \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{12}^{\text{I}} - \frac{T \sin \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} m_{22}^{\text{I}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_1 (N - 2n_1 - n_2)}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} - \frac{T \cos \varphi_2 n_2 (N - n_1 - 2n_2)}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 2U \right) m_{12}^{\text{IV}} \\
&- \left(\frac{T \cos \varphi_1 n_1^2}{2(n_1(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + \frac{2T \cos \varphi_2}{\sqrt{n_2(N - n_1 - n_2)}} \right. \\
&+ \left. \frac{T \cos \varphi_2 (N - n_1 - 2n_2)^2}{2(n_2(N - n_1 - n_2))^{3/2}} + 4U \right) m_{22}^{\text{IV}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{11}^{\text{III}} &= 2T \sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)} \cos \varphi_1 m_{11}^{\text{I}} + \frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} (N - 2n_1 - n_2) m_{11}^{\text{III}} \\
&- \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{21}^{\text{III}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\dot{m}_{12}^{\text{III}} &= 2T \sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)} \cos \varphi_1 m_{12}^{\text{I}} + \frac{T \sin \varphi_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} (N - 2n_1 - n_2) m_{12}^{\text{III}} \\
&- \frac{T \sin \varphi_1 n_1}{\sqrt{n_1(N - n_1 - n_2)}} m_{22}^{\text{III}}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{21}^{\text{III}} &= 2T\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_2\ m_{21}^{\text{I}} - \frac{T\sin\varphi_2\ n_2}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{11}^{\text{III}} \\ &+ \frac{T\sin\varphi_2(N-n_1-2n_2)}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{21}^{\text{III}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{22}^{\text{III}} &= 2T\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_2\ m_{22}^{\text{I}} - \frac{T\sin\varphi_2\ n_2}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{12}^{\text{III}} \\ &+ \frac{T\sin\varphi_2(N-n_1-2n_2)}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{22}^{\text{III}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{11}^{\text{IV}} &= 2T\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_1\ m_{11}^{\text{II}} + \frac{T\sin\varphi_1}{\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}}(N-2n_1-n_2)\ m_{11}^{\text{IV}} \\ &- \frac{T\sin\varphi_1\ n_1}{\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}}\ m_{21}^{\text{IV}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{12}^{\text{IV}} &= 2T\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_1\ m_{21}^{\text{II}} + \frac{T\sin\varphi_1}{\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}}(N-2n_1-n_2)\ m_{12}^{\text{IV}} \\ &- \frac{T\sin\varphi_1\ n_1}{\sqrt{n_1(N-n_1-n_2)}}\ m_{22}^{\text{IV}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{21}^{\text{IV}} &= 2T\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_2\ m_{21}^{\text{II}} - \frac{T\sin\varphi_2\ n_2}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{11}^{\text{IV}} \\ &+ \frac{T\sin\varphi_2(N-n_1-2n_2)}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{21}^{\text{IV}}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\dot{m}_{22}^{\text{IV}} &= 2T\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}\cos\varphi_2\ m_{22}^{\text{II}} - \frac{T\sin\varphi_2\ n_2}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{12}^{\text{IV}} \\ &+ \frac{T\sin\varphi_2(N-n_1-2n_2)}{\sqrt{n_2(N-n_1-n_2)}}\ m_{22}^{\text{IV}}\end{aligned}$$

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit ohne unzulässige Hilfe Dritter und ohne Benutzung anderer als der angegebenen Hilfsmittel angefertigt habe; die aus fremden Quellen direkt oder indirekt übernommenen Gedanken sind als solche kenntlich gemacht.

Die Arbeit wurde bisher weder im Inland noch im Ausland in gleicher oder ähnlicher Form einer anderen Prüfungsbehörde vorgelegt.

Die Dissertation wurde an der Technischen Universität Dresden unter Betreuung von Herrn Prof. Dr. Walter Strunz angefertigt.

Ich erkenne die Promotionsordnung der Fakultät Mathematik und Naturwissenschaften an der Technischen Universität Dresden vom 20. März 2000 mit allen Änderungssatzungen bis zum 17.07.2008 an.

Dresden, den 23.11.2012

Lena Simon

Danksagung

Schließlich ist es mir eine große Freude, mich noch einmal an all jene zu wenden, die mir die Balance zwischen den Herausforderungen der Physik und der Leichtigkeit des Seins finden halfen und so zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

An vorderster Stelle denke ich an meinen Doktorvater Walter Strunz, der es nicht nur verstand, mein Interesse an der theoretischen Physik zu wecken, und mich zum Sprung ins ultrakalte Bose-Gas ermunterte, sondern mir auch stets eine große Stütze war in Fragen meiner Forschung und Promotion. Über das Fachliche hinaus verstand er es, ein angeregtes und doch entspanntes freundliches Miteinander in der Arbeitsgruppe zu gestalten. Für das Alles sei ihm von ganzem Herzen gedankt!

Für fruchtbare wissenschaftliche Gespräche und kompetente Unterstützung meiner Arbeit danke ich im Weiteren den Semiklassik-Experten Frank Großmann und Werner Koch.

Dass ich hier in Dresden in einem inspirierenden und fröhlichen Umfeld leben und arbeiten durfte, habe ich vielen zu verdanken. Natürlich gilt mein Dank den netten Kollegen am Institut für Theoretische Physik. Aus diesen sind vielfach Freunde geworden, die ein tolles Klima am Arbeitsplatz garantierten. Die Freiburger, mit denen ich nun schon viele schöne Jahre erlebt habe, werde ich in guter Erinnerung behalten. Ob in der \hbar , in netter Runde mit Biergit Becks-Lübzer oder unter Einsatz der Dresdner Feuerwehr, selbst gesellige Abende waren niemals ganz physikfern. Der TQO-Nachwuchs sei ebenfalls nicht vergessen: Die Superhelden-Geschichten, der gemeinsame Kampf beim Boltzmann-Cup und die siegreichen Grillabende sowie andere unterhaltsame Stunden halfen mir, den Kopf für die Wissenschaft frei zu bekommen. Nicht zuletzt „die Zuagroasten“ haben es mir leicht gemacht, in Dresden heimisch zu werden. Euch allen vielen Dank!

Den Koordinatoren der „International Max Planck Research School“ möchte ich für das wissenschaftlich inspirierende Umfeld und die finanzielle Unterstützung meinen Dank ausdrücken. Auch verdanke ich der IMPRS die Bekanntschaft mit meinem guten Freund Hugo, dem ich für den letzten wunderbaren Sommer danken möchte – der Vierer-Pasch hat uns Glück gebracht!

Und natürlich danke ich schlussendlich meiner Familie, deren liebevoller Unterstützung in Rat und Tat ich in allen Lebenslagen stets gewiss sein konnte.